

Potentiometrie- und Elektromigrationsuntersuchungen an metallischen Oberflächen

Der Fakultät für Physik der Universität Duisburg-Essen
vorgelegte

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Dr. rer. nat.

von

Mark R. Kaspers

geboren am 19. Januar 1981 in Duisburg

Tag der Disputation: 06. September 2013

Erstgutachter: Herr Prof. Dr. R. Möller

Zweitgutachter: Herr Dr. M. Wenderoth

Prüfungsvorsitz: Herr Prof. Dr. D. Wolf

Prüfer: Herr PD Dr. F.-J. Meyer zu Heringdorf

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit elementaren Prozessen beim elektrischen Transport von Ladungsträgern an Oberflächen und Grenzschichten. Es wird unterschieden zwischen der lokalen Untersuchung der elektrischen Leitfähigkeit auf atomarer Skala mit Hilfe der Rastertunnelpotentiometrie (STP) und der Untersuchung von Effekten, die auf der Elektromigration von Material unter elektrischer Belastung basieren.

Durchgeführt wurden diese Experimente an einem Vier-Spitzen-Rastertunnelmikroskop. Dieses Instrument bietet die Möglichkeit, gezielt Ladungsträger in mikroskopische Strukturen auf der Nanometerskala zu injizieren und dabei den elektrischen Transport und dessen Auswirkungen auf die mikroskopische Struktur bis hinunter auf die atomare Skala zu untersuchen.

Im Rahmen der STP-Experimente wurde die Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche makroskopisch und auf atomarer Skala untersucht. Die gefundene, abrupte Änderung der Leitfähigkeit bei einer Temperatur von ca. 220 K basiert möglicherweise auf einer starken Temperaturabhängigkeit der zuleitenden Kontakte. Ein Phasenübergang von HCT- zu IET-Struktur konnte als Ursache für die Leitfähigkeitsänderung nicht bestätigt werden.

Am System Ge(001)c(8×2)-Au, das an der Oberfläche ein eindimensional elektronisches System aus atomaren Nanodrahtstrukturen mit vernachlässigbarer Wechselwirkung untereinander bildet, wurden ebenfalls STP-Messungen durchgeführt. Hier wird gezeigt, dass diese Nanodrahtstrukturen elektrisch mit einer darunter vergrabenen, zweidimensional leitfähigen Schicht gekoppelt sind, die vermutlich aus Gold und Germanium besteht. Ebenfalls auf der Oberfläche gewachsene, einkristalline Goldinseln stehen ebenfalls in elektrischem Kontakt zu der vergrabenen Schicht. Des Weiteren wird gezeigt, dass die Nanodrähte elektrisch nicht an die Goldinseln koppeln. Die Goldinseln können nicht dazu genutzt werden, die Nanodrähte elektrisch zu kontaktieren.

Bei der Untersuchung des elektrischen Transports in Nanostrukturen bei höheren Stromdichten konnten mit Hilfe der Rastertunnelmikroskopie morphologische Änderungen der Oberfläche eines einkristallinen Silber-Nanodrahts gefunden werden. Bei Stromdichten von $1.5 \cdot 10^7 \text{ Acm}^{-2}$ wurden Bewegungen von Stufenkanten, Inseln und Löchern beobachtet. Die Ergebnisse wurden im Rahmen von Wind- und Direktkraft interpretiert. Sie zeigen, dass für dieses System auf mikroskopischer Skala die elementaren Prozesse, die zum Ausfall makroskopischer, metallischer Leiter führen können, durch die Windkraft dominiert werden.

Abstract

This thesis deals with the elementary processes of the electric transport of charge carriers at surfaces and interfaces. The thesis is divided into two parts: The local study of the electric conductance at the atomic scale using scanning tunneling potentiometry (STP) and the analysis of electromigration processes, i.e. the current induced motion of atoms in a conductor, using scanning tunneling microscopy (STM).

The experiments were carried out using a four tip scanning tunneling microscope which gives the unique opportunity to inject charge carriers into microscopic nanostructures. Thereby the electric transport properties of the surface and the impact to the microscopic surface structure were analyzed with atomic scale resolution.

By means of scanning tunneling potentiometry the temperature dependence of the conductance of the $\text{Si}(111)-(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{-Ag}$ surface is studied. At a temperature of 220 K a change in the conductance is observed, which is probably caused by the strong temperature dependence of the contacts. A surface phase transition from the HCT- to the IET-structure could not be approved to be responsible for the change in conductance.

At the $\text{Ge}(001)c(8 \times 2)\text{-Au}$ surface, which forms an atomic chain architecture with an one dimensional electron system with negligible interchain coupling, scanning tunneling potentiometry reveals a conductive layer, supposedly consisting of gold and germanium, buried underneath the surface. The surface nanowires are electrically coupled to this buried layer. Additional, single-crystalline gold islands, simultaneously grown on top of the Au/Ge surface, are also coupled to the buried layer, but are decoupled from the nanowires. Thus, those gold islands cannot be used to establish electrical contacts to the nanowires.

To probe the electric transport at higher current densities in nanoscale devices scanning tunneling microscopy was used. Thereby, morphological changes at the surface of a single-crystalline silver nanowire were studied. Due to the electrical stressing at a current density of $1.5 \cdot 10^7 \text{ A cm}^{-2}$ the motion of step edges, islands and holes occurs. The findings are interpreted in the framework of electromigration's Wind and Direct force. For the given system the elementary processes, which may lead to the failure of macroscopic integrated circuits, are identified as a result of the Wind force and visualized by video imaging using a STM.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen	3
2.1. Rastertunnelmikroskopie	3
2.1.1. Aufbau und Funktionsweise des Rastertunnelmikroskops (STM) . .	3
2.1.2. Tunneltheorie nach Tersoff und Hamann	7
2.2. Lokales elektrochemisches Potential beim Ladungstransport in Oberflächen	10
2.2.1. Diffuser Transport nach Drude und Sommerfeld	11
2.2.2. Ballistischer Transport nach Landauer	14
2.2.3. Das elektrochemische Potential im Experiment: $\mu_{ec,STP}$	15
2.3. Rastertunnelpotentiometrie (STP)	20
2.4. Thermospannungsbeitrag zum elektrochemischen Potential	25
2.5. Elektromigration auf mikroskopischer Skala	27
3. Experimenteller Aufbau	31
3.1. Das Multiprobe UHV-System: Analyse- und Präparationskammer	31
3.1.1. Präparationskammer	31
3.1.2. Analysekanne	34
3.2. Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED)	38
3.3. Rasterelektronenmikroskopie (SEM)	40
3.4. Tunnel- und Kontaktsptzen	44
3.4.1. Präparation	45
3.4.2. Charakterisierung der Tunnelspitzen	50
3.5. Kalibrierung des Rastertunnelmikroskops	54
3.6. Messdatenerfassung und -auswertung	55

4. Präparation und strukturelle Analyse der Proben	57
4.1. Si(111)-(7 × 7)	57
4.2. Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag	59
4.3. Ge(001)c(8 × 2)-Au	62
4.4. Ag/Si(001) - Ag-Nanodrähte	65
5. Rastertunnelpotentiometrie (Ergebnisse und Diskussion)	67
5.1. Temperaturabhängige Potentiometrie auf Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag	67
5.1.1. Ergebnisse	70
5.1.2. Diskussion	81
5.2. Potentiometrie auf Ge(001)c(8 × 2)-Au	92
6. Elektromigration (Ergebnisse und Diskussion)	105
6.1. Strominduzierte Oberflächendiffusion auf einem einkristallinen Ag-Nanodraht	105
7. Zusammenfassung und Ausblick	117
A. Anhang	121
A.1. Dimensionalität der elektrischen Leitfähigkeit in dünnen Schichten	121
A.2. Verteilung des elektrischen Feldes \vec{E} und der Stromdichte \vec{j} in der Ebene .	123
Literaturverzeichnis	141
Danksagung	143
Veröffentlichungen	147
Erklärung	151

Verzeichnis der Abkürzungen

2DEG	zweidimensionales Elektronengas
\AA	Einheitszeichen für die atomare Längeneinheit Angstrom, $1 \text{\AA} = 0.1 \text{ nm}$
E_F	Fermienergie
EM	Elektromigration
I_t	Tunnelstrom
IVC	Strom-Spannung-Umwandler, engl. I-V-converter
LDOS	Lokale elektronische Zustandsdichte, engl. local density of states
LEED	Beugung niederenergetischer Elektronen, engl. low energy electron diffraction
ML	Monolage
$\mu_{ec,STP}$	elektrochemisches Potential
RT	Raumtemperatur, 300 K
SEM	Rasterelektronenmikroskop, engl. scanning electron microscope
STM	Rastertunnelmikroskop, engl. scanning tunnelling microscope
STP	Rastertunnelpotentiometrie, engl. scanning tunnelling potentiometry

TEM	Transmissionselektronenmikroskop
UHV	Ultrahochvakuum
U_t	Tunnelspannung

1. Einleitung

Die Entwicklung aktueller elektronischer Bauteile ist stark limitiert durch die minimal erreichbare Leiterbahngröße, die momentan im Bereich einiger Nanometer liegt [1]. Bei den damit verbundenen hohen Stromdichten in solchen nanoskaligen Leiterbahnen kann der elektrische Strom strukturelle Änderungen durch Elektromigration, d.h. die strominduzierte Bewegung einzelner Atome des Leiters, hervorrufen [2, 3].

Die physikalischen Eigenschaften der Oberfläche unterscheiden sich zum Teil stark von denen des Festkörpers. Immer kleiner werdende Leiterbahngrößen führen zudem dazu, dass die elektronischen Eigenschaften der Oberfläche eines elektrischen Leiters im Gegensatz zu den Volumeneigenschaften immer wichtiger und dominierender werden und schlussendlich den elektrischen Transport bestimmen. Es ist daher unabdingbar, die mikroskopischen Beiträge zum elektrischen Widerstand zu erforschen. Es gilt herauszuarbeiten, wie sich der elektrische Transport in nanoskaligen Systemen und auf atomarer Skala bei großen vorherrschenden Stromdichten verhält. Dazu wird untersucht, wie sich der ohmsche Widerstand aus elementaren Beiträgen zusammensetzt [4] und es müssen die mikroskopischen Mechanismen herausgearbeitet werden, die dazu führen, dass ab einer bestimmten Stromdichte die im Leiter deponierte elektrische Leistung ausreicht, ihn bis hin zum Ausfall zu schädigen.

Genau an dieser Stelle setzt diese Arbeit mit der Untersuchung von zwei grundlegenden Fragestellungen auf dem Gebiet der Oberflächenphysik an:

- Aufgrund der Bedeutung der Oberfläche für den elektrischen Transport bietet sich für die Analyse der zugrunde liegenden Effekte die Methode der Rastertunnelmikroskopie in Kombination mit der Rastertunnelpotentiometrie an. Sie kann Aufschluss über die räumliche Verteilung des *elektrochemischen Potentials* beim Stromfluss an der Leiteroberfläche geben; und das mit der lateralen Auflösung des Rastertunnelmikroskops. Auf diese Weise erhält man Einblick in elementare Streumechanismen von Leitungselektronen auf der atomaren Skala. Zwei Materialsysteme sollen im Rahmen dieser Arbeit mittels der Rastertunnelpotentiometrie untersucht werden. Erstes untersuchtes System ist die Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche: Wie verhält sich die

Leitfähigkeit der Oberfläche, wenn die Probentemperatur variiert wird? Kann die Oberfläche bei verschiedenen Temperaturen stabil kontaktiert werden? Zum anderen wird die Ge(001)c(8×2)-Au Oberfläche untersucht: Können über die eindimensional leitenden, ein Atom dicken Drähte, die die Oberfläche ausbildet [5, 6], gezielt einzelne Moleküle kontaktiert werden? Zudem soll die Leitfähigkeit dieser Drahtstrukturen mittels STP genau analysiert werden.

- Die *Elektromigration* gilt häufig als eine Ursache für den Ausfall von elektrischen Leiterbahnen und bestimmt somit direkt die mögliche Lebensdauer eines elektronischen Bauteils [7, 8, 9, 10, 11]. Ein wesentlicher Aspekt dieser Arbeit wird es sein Fragen zu beantworten, die sich mit den elementaren Effekten der Elektromigration befassen, um die Lebensdauer zukünftiger elektronischer Bauteile zu verlängern: Welches Modellsystem eignet sich für die gezielte Untersuchung elektromigrations-relevanter Fragestellungen? Welche Mechanismen steuern in dem gewählten Modellsystem bzw. dem gewählten Material die Elektromigration? Wie vollzieht das untersuchte Material Elektromigration? Bei welcher Schwellstromdichte beginnt das System Elektromigration zu zeigen?

Für all diese Vorhaben bietet sich das *Nanoprobe*-System an, ein kommerziell verfügbares Vier-Spitzen-Rastertunnelmikroskop. Das Instrument verbindet die Vielseitigkeit eines Mehr-Sonden-Aufbaus mit dem mikroskopischen Auflösungsvermögen des Rastertunnelmikroskops und bietet mit Hilfe des Rasterelektronenmikroskops ideale Voraussetzungen, gezielt nanoskalige Strukturen im Ultrahochvakuum zu untersuchen.

Eingegliedert ist die vorliegende Arbeit in das Teilprojekt C2 „*Reibung von Leitungselektronen an Grenzflächen*“ des Sonderforschungsbereichs 616 „*Energiedissipation an Oberflächen*“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft.

2. Grundlagen

2.1. Rastertunnelmikroskopie

2.1.1. Aufbau und Funktionsweise des Rastertunnelmikroskops (STM)

Das Rastertunnelmikroskop (kurz STM, von engl. scanning tunnelling microscope) wurde 1982 von *Gerd Binnig* und *Heinrich Rohrer* (Abbildung 2.1) entwickelt und der Öffentlichkeit vorgestellt [12, 13, 14, 15]. 1986 erhielten Sie hierfür den Nobelpreis für Physik¹. Damals einzigartig war das STM aufgrund der Fähigkeit, kleinste Strukturen auf atomarer Skala im Realraum abzubilden. Heute gehört es zu den Standardanalysemethoden der Oberflächenanalytik.

Das STM basiert auf dem sogenannten Tunneleffekt. Um diesen zu veranschaulichen, kann man zunächst im Rahmen der klassischen Physik den elektrischen Kontakt zwischen zwei Elektroden betrachten. Damit ein Strom I bei einer angelegten Spannung U fließen kann, das heißt Elektronen sich von der einen in die andere Elektrode bewegen können, müssen sich die beiden Elektroden in Kontakt befinden. Sobald der Kontakt gelöst wird, fließt der Strom nicht mehr. Betrachtet man die gleiche Situation im Rahmen der Quantenmechanik kommt der sogenannte Tunneleffekt zum tragen, vereinfacht dargestellt in Abbildung 2.2. Ist der Zwischenraum zwischen den beiden Elektroden (1 und 2), die sogenannte Tunnelbarriere, schmal genug und energetisch nicht unendlich hoch, können Elektronen von der einen in die andere Elektrode gelangen und ein Strom fließt.

Im Rahmen dieser Betrachtung muss die Schrödingergleichung für die Bereiche in der linken Elektrode, in der Tunnelbarriere und in der rechten Elektrode gelöst werden. Man betrachtet hierzu eine ebene Welle, die von links auf die Barriere zu läuft. Die Lösung der Schrödingergleichung zeigt, dass es eine gewisse Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elek-

¹Die andere Hälfte des Nobelpreises für Physik 1986 wurde an Ernst Ruska vergeben, der für die Entwicklung des Rasterelektronenmikroskops ausgezeichnet wurde.

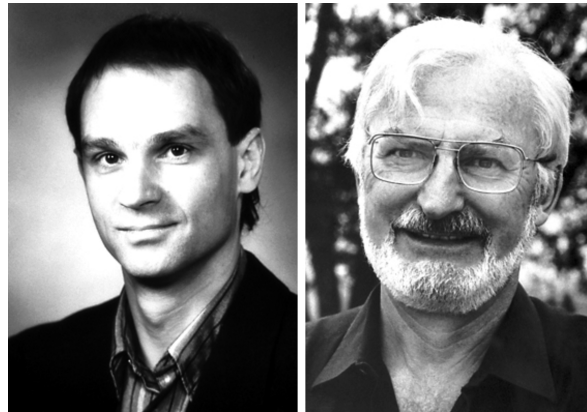


Abbildung 2.1.: G. Binnig und H. Rohrer. Aus [16].

tronen jenseits der Barriere in der rechten Elektrode gibt, die nicht null ist. Dies bedeutet, dass ein Elektron mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit die Tunnelbarriere durchdringen, man sagt auch durchtunneln, kann und in der zweiten Elektrode erscheint. Daraus folgt ein Stromfluss über die Tunnelbarriere hinweg.

Übertragen auf das STM bedeutet dies: Platziert man eine Elektrode, hier eine metallische feine Nadel, die Tunnelspitze, nahe einer elektrisch leitenden Oberfläche und legt zwischen diesen beiden eine elektrische Spannung U_t an, fließt der sogenannte Tunnelstrom I_t . Dieser Tunnelstrom ist exponentiell abhängig vom Abstand d zwischen Tunnelspitze und Probenoberfläche:

$$I_t \propto e^{-2d\kappa}$$

2κ ist hier die Abklinglänge des Tunnelstroms, materialspezifisch und liegt in der Größenordnung von 0.1 \AA^{-1} . Sie ergibt sich aus den Austrittsarbeiten von Spitze und Probe. Das STM ist somit extrem empfindlich auf Änderungen der Höhe d der Spitze über der Probe. Ändert sich diese um 1 \AA beträgt die Änderung des Tunnelstroms bereits eine ganze Größenordnung. Damit ist das STM in der Lage, atomare Höhenunterschiede zu messen (siehe Kapitel 2.1.2).

In Abbildung 2.3 ist der Aufbau eines STM schematisch dargestellt. Eine metallische Spitze befindet sich im Tunnelabstand d über einer elektrisch leitenden Probe. Typische Tunnelabstände liegen im Bereich von wenigen \AA . Die Tunnelspannung U_t kann an Spitze oder Probe angelegt werden². Ihr Vorzeichen gibt vor, ob besetzte oder unbesetzte elektronische Zustände der Spitze oder Probe untersucht werden. Der gemessene Tunnelstrom

²In dieser Arbeit wird, wenn nicht anders angegeben, die Tunnelspannung U_t an der Probe angelegt.

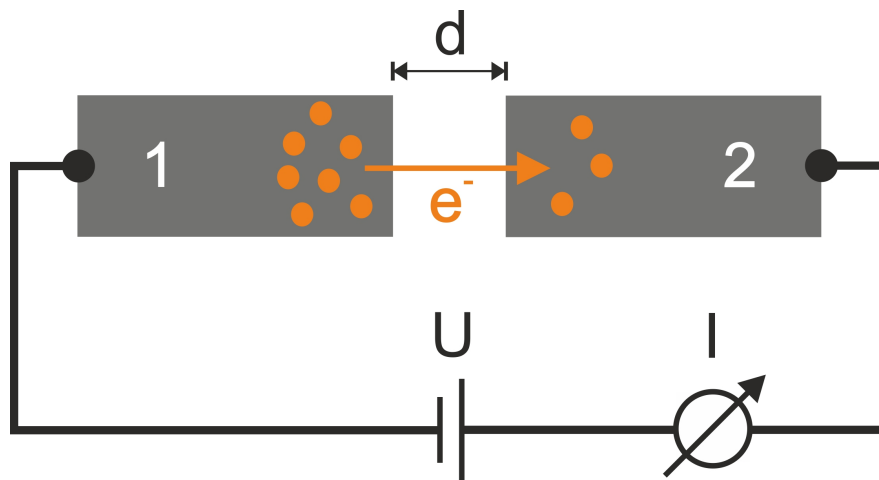


Abbildung 2.2.: Schematische Darstellung eines Stromflusses zwischen zwei Elektroden 1 und 2, die nicht in physischem Kontakt zueinander stehen. Der quantenmechanische Tunneleffekt erlaubt den Elektronen das Durchdringen der Vakuumbarrriere mit der Dicke d . Hier sind U die angelegte Spannung und I der sich einstellende Strom.

wird mit Hilfe eines Strom-Spannungs-Konverters (IVC) in eine dem Strom proportionale Spannung umgewandelt und verstärkt. Ein typischer Proportionalitätsfaktor (Verstärkung) ist hier 10^9 , das heißt 1 nA Tunnelstrom entsprechen konvertiert 1 V . Die Konvertierung ist notwendig, da die Regelungselektronik Spannungsdifferenzen besser verarbeiten kann als Stromdifferenzen. Anschließend wird das so erhaltene Spannungssignal gleichgerichtet und logarithmiert. So erhält man eine lineare Beziehung zum Tunnelabstand. Dieser logarithmierte Istwert des Tunnelstroms wird mit einem vorgegebenen Sollwert verglichen und die Regeldifferenz ausgegeben. Diese Regeldifferenz wird kompensiert indem der Tunnelabstand variiert wird. Dazu wird das Ausgangssignal der Regelung über einen Hochspannungsverstärker an einen Piezokristall gegeben, an den die Spitze montiert ist. Der Piezokristall ist in der Lage, die Position und die Höhe der Tunnelspitze bei geeigneter Spannung auf sub- nm -Skala genau einzustellen und ermöglicht so hochauflösende Aufnahmen atomar kleiner Strukturen.

Zeichnet man das Ausgangssignal der Regelung, das direkt proportional zur Höhenposition der Spitze ist, und die Position der Spitze in der x-y-Ebene auf, erhält man ein dreidimensionales Abbild der Probenoberfläche³.

³Kapitel 2.1.2 wird zeigen, dass das STM eigentlich Flächen konstanter Zustandsdichte abbildet. Diese Abbildung entspricht meist gut der Topografie der Probenoberfläche und wird daher oftmals damit gleichgesetzt.

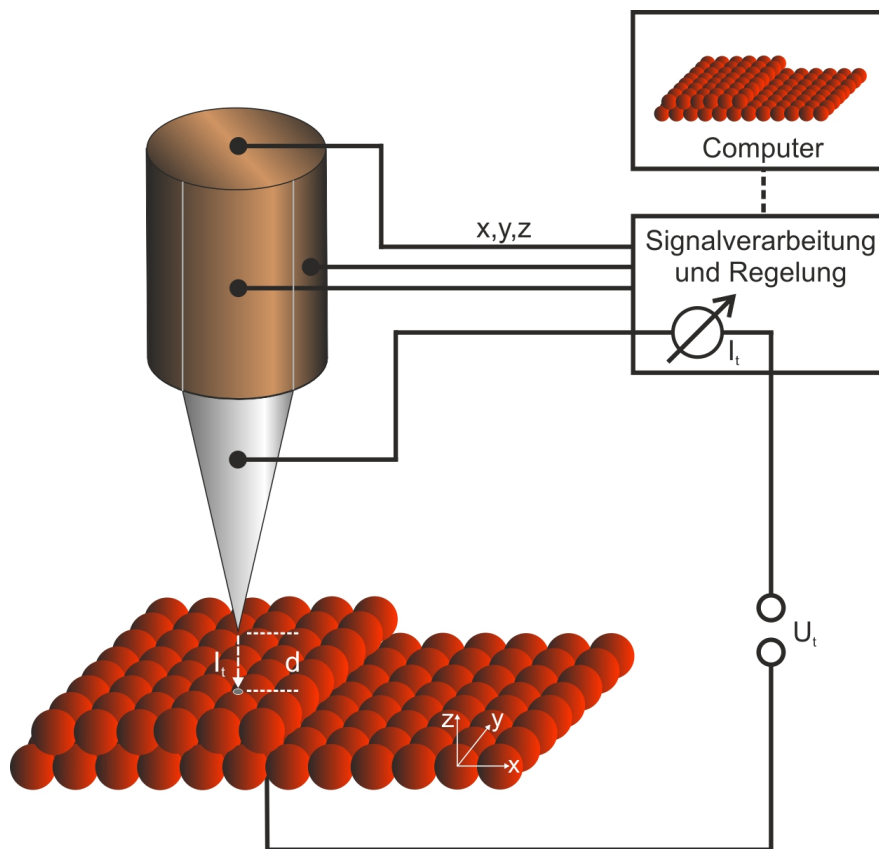


Abbildung 2.3.: Schematischer Aufbau eines Rastertunnelmikroskops.

Des Weiteren ist der Tunnelstrom nicht nur eine Funktion des Abstands zwischen Spitze und Probenoberfläche, sondern hängt darüber hinaus noch von materialspezifischen Parametern ab.

Ein typisches topografisches Bild ist in [Abbildung 2.4](#) gezeigt. Es handelt sich um die STM-Aufnahme der Au(111)-Oberfläche. Dieses System wird im verwendeten STM dazu genutzt, Tunnelspitzen auf ihre elektronischen Eigenschaften zu testen und zu bewerten (siehe [Kapitel 3.4](#)).

Prinzipiell kann das STM in verschiedenen Betriebsmodi betrieben werden: Im Konstant-Strom-Modus (engl. constant-current-mode), der in dieser Arbeit ausschließlich genutzt wird, versucht die Regelelektronik den Tunnelstrom konstant zu halten und ändert dafür die Höhe der Spitze über der Probe.

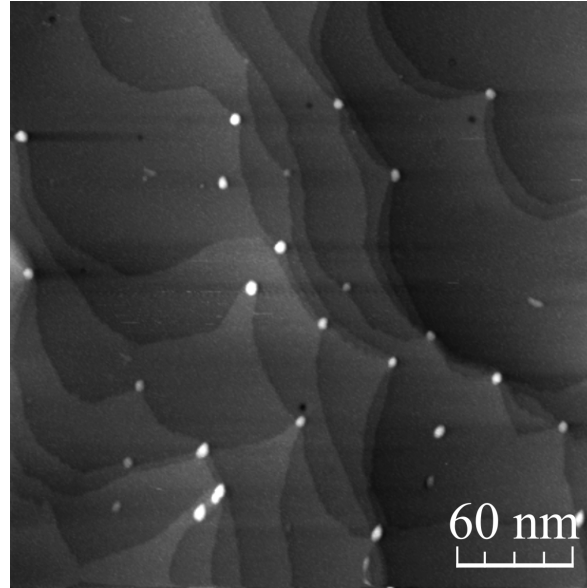


Abbildung 2.4.: STM-Aufnahme von Au(111) bei $U_t = 0.5 \text{ V}$, $I_t = 50 \text{ pA}$, 300 K .

2.1.2. Tunneltheorie nach Tersoff und Hamann

Kurz nach der Präsentation des ersten Rastertunnelmikroskops stellten *J. Tersoff* und *D.R. Hamann* 1983 ihre Näherung für den Tunnelstrom vor [17, 18].

Das planare Tunneln in einem Metall-Isolator-Metall-Kontakt kann vereinfacht mit Hilfe der sogenannten Bardeen-Näherung beschrieben werden [19]. Darauf aufbauend formulierten *J. Tersoff* und *D.R. Hamann* ihren Ansatz für die Tunnelstromberechnung, der eine reale Probengeometrie und eine s-förmige Wellenfunktion der Spitze berücksichtigt. Es handelt sich um die erste Arbeit, die die laterale Auflösung des STM erklärt.

An dieser Stelle sollen nur die Kernaussagen der *Tersoff-Hamann-Tunneltheorie* wiedergegeben werden. Die Einzelheiten können [18] entnommen werden.

Als Ausgangspunkt für die Berechnung des Tunnelstroms dient der *Bardeen-Formalismus*:

$$I_t = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{S,P} f(E_S) [1 - f(E_P + eU_t)] |M_{S,P}|^2 \delta(E_S - E_P) \quad (2.1)$$

Hier ist U_t die zwischen Spitze und Probe angelegte Spannung (Tunnelspannung), $f(E)$ ist die Fermi-Funktion, $|M_{S,P}|$ ist das Matrix-Tunnelement zwischen elektronischen Zuständen der Oberfläche ψ_P der Probe (P) und Zuständen ψ_S der Spitze (S), E_S und E_P sind die jeweiligen Energien der Zustände ψ_S und ψ_P im ungestörten System.

Das eigentliche Problem ist, das Matrixelement korrekt zu berechnen. Hierzu werden explizite Ausdrücke für die Spitzenfunktion ψ_S und die Oberflächenfunktion ψ_P benötigt. Tersoff und Hamann nehmen für die Tunnelspitze eine s-förmige Wellenfunktion an. Das Krümmungszentrum liegt, wie Abbildung 2.5 zeigt, bei r_0 mit Radius R . Die Probe wird mittels Bloch-Wellenfunktionen beschrieben. Das Matrixelement kann nach Bardeen geschrieben werden als:

$$|M_{S,P}| = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{S} \cdot (\psi_S^* \vec{\nabla} \psi_P - \psi_P^* \vec{\nabla} \psi_S) \quad (2.2)$$

Die Integrationsfläche $d\vec{S}$ liegt vollständig zwischen Spitze und Probe, also innerhalb der Barriere (vergleiche Abbildung 2.5).

Zur Vereinfachung betrachten Tersoff und Hamann nur kleine Spannungen (meV für Metall-Metall-Tunnelkontakte) und tiefe Temperaturen.

Tersoff und Hamann finden schließlich, ausgehend von Bardeens Ansatz (siehe Gleichung 2.1), folgenden Ausdruck für den Tunnelstrom:

$$I_t = \frac{32\pi^3}{\hbar} e^2 U_t \phi^2 D_S(E_F) R^2 \kappa^{-4} e^{2\kappa R} \sum_P |\psi_P(\vec{r}_0)|^2 \delta(E_P - E_F) \quad (2.3)$$

Hier ist D_S die als konstant angesehene Zustandsdichte pro Einheitsvolumen in der Spitze an der Fermienergie, $\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\Phi}$ ist die Abklinglänge der Wellenfunktion ins Vakuum und Φ ist die Austrittsarbeit. Die Austrittsarbeiten von Spitze und Probe werden als gleich angenommen: $\Phi_S = \Phi_P$.

Der Term

$$\rho(\vec{r}_0, E_P) = \sum_P |\psi_P(\vec{r}_0)|^2 \delta(E_P - E_F)$$

gibt die lokale Zustandsdichte der Probe am Ort r_0 , also im Zentrum der Kugel, an. Das STM bildet folglich im Konstant-Strom-Modus Flächen konstanter Zustandsdichte der Probe ab. Der Tunnelstrom ist für kleine Spannungen linear abhängig von der Tunnelspannung. Die Wellenfunktionen ψ_P des Festkörpers, beschrieben durch Bloch-Wellen, fallen exponentiell mit der Abklinglänge κ ins Vakuum ab. Mit

$$I_t \propto |\psi_P(\vec{r}_0)|^2 \propto e^{-2\kappa d}$$

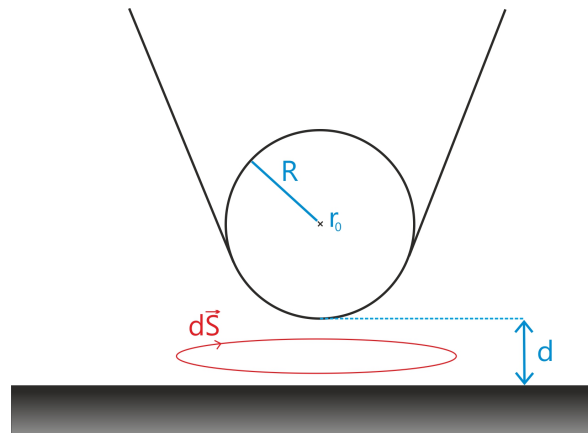


Abbildung 2.5.: Tunnelgeometrie im *Tersoff-Hamann-Modell*: Die am vordersten Punkt als sphärisch angenommene Tunnelspitze mit Radius R und Krümmungsmittelpunkt r_0 befindet sich im Tunnelabstand d über der Probenoberfläche. Die eingezeichnete Integrationsfläche (rot) liegt vollständig zwischen Spitze und Probe in der Barriere.

ergibt sich direkt die exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms I_t vom Abstand d .

Die Abklinglänge $\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\Phi}$ ist abhängig von der Austrittsarbeit Φ . Setzt man einen typischen Wert von $\Phi = 4 \text{ eV}$ ein folgt $\kappa \approx 1 \text{ \AA}^{-1}$ und zeigt direkt die Empfindlichkeit des Tunnelstroms auf kleinste Abstandsänderungen.

Das laterale Auflösungsvermögen des STM folgt bei Spitzenradius R um den Spitzenmittelpunkt r_0 und Abstand d zwischen Probenoberfläche und Tunnelspitze (siehe Abbildung 2.5) zu:

$$\delta x = \sqrt{2\text{\AA}(R + d)}$$

2.2. Lokales elektrochemisches Potential beim Ladungstransport in Oberflächen

Die Besetzungsverteilung von Elektronen in einem Festkörper im thermischen Gleichgewicht wird durch die Fermi-Funktion $f(\epsilon, T)$ beschrieben:

$$f(\epsilon, T) = \frac{1}{1 + e^{\frac{\epsilon}{k_B T}}} \quad (2.4)$$

$\epsilon = E - \mu_{ec}$ ist hier die Energiedifferenz des Elektrons zum elektrochemischen Potential μ_{ec} , T gibt die Temperatur an und k_B ist die Boltzmann-Konstante. Das elektrochemische Potential μ_{ec} eines kristallinen Festkörpers ist im thermischen Gleichgewicht definiert als

$$\mu_{ec} = \mu_c - e\Phi. \quad (2.5)$$

μ_c ist das chemische Potential und Φ das elektrostatische Potential eines Elektrons. μ_c hat die Dimension Energie. μ_{ec} wird gebildet aus der Summe von chemischem Potential und elektrostatischem Potential multipliziert mit der Elementarladung. Das Konzept des elektrochemischen Potentials wird dann benötigt, wenn ein größeres System aus vielen kleineren Subsystemen zusammengesetzt ist, die zwar im *lokalen* thermodynamischen Gleichgewicht, allerdings nicht im globalen thermodynamischen Gleichgewicht sind. Die zuvor einheitliche Fermienergie des Systems wird dann in *lokale* Quasi-Fermienergien oder *lokale* Quasi-Fermilevel (QFL) F^n überführt. Diese Situation wird im weiteren Verlauf näher beschrieben. Ein Pionier auf dem Gebiet des elektrischen Ladungstransports auf atomarer Längenskala ist *S. Datta*. In „Electronic Transport in Mesoscopic Systems“ [20] findet sich eine Zusammenstellung seiner Arbeiten auf dem Gebiet des elektronischen Transports, die eine Große Relevanz für das Gebiet der Rastertunnelpotentiometrie haben [21, 4, 22]. Im Folgenden soll daher auf die Lehrmeinung von *S. Datta* eingegangen werden [20], die ebenfalls von *J. Homoth* in seiner Dissertationsschrift im Hinblick auf die Rastertunnelpotentiometrie betrachtet wurde [21].

Es werden die absoluten Grenzfälle der Transporttheorie dargestellt: zum einen rein diffuser Transport, gehindert durch delokalisierte Streuprozesse, und zum anderen ballistischer Transport mit lokalisierten Streuereignissen.

2.2.1. Diffuser Transport nach Drude und Sommerfeld

Im Jahr 1900 entwickelte *P. Drude* sein Modell der diffusen Leitfähigkeit, das 1933 von *A. Sommerfeld* und *H. Bethe* um die effektive Elektronenmasse m^* und die Modellierung der Elektronengesamtheit als Fermigas weiterentwickelt wurde [23]. Das sogenannte Drude-Sommerfeld-Modell beschreibt den diffusen Transport von Elektronen in einem metallischen Leiter.

Man nimmt an, dass eine Anzahl n von Elektronen pro Volumeneinheit sich mit der Geschwindigkeit \vec{v} bewegt. Jedes Elektron trage die Ladung $-e$. Die Stromdichte kann dann angegeben werden durch:

$$\vec{j} = -n e \vec{v}$$

Die Betrachtung wird im folgenden nur in einer Dimension fortgesetzt. In einem konstanten elektrischen Feld erfahren Elektronen eine Kraft F , die sie beschleunigt:

$$F = m^* \cdot \frac{dv}{dt} + \frac{m^*}{\tau} \cdot v_D = -e E$$

m^* ist die effektive Masse der Elektronen, durch die der Einfluss des Atomgitters in die Betrachtung einfließt. v_D ist die Driftgeschwindigkeit der Elektronen. Der zweite Term beugt einem unendlichen Beschleunigen der Elektronen durch das elektrische Feld vor; nach Ablauf der mittleren Streuzeit τ zwischen Stößen von Elektronen kehrt das betrachtete System wieder ins Gleichgewicht zurück. Den Elektronen kann eine mittlere Driftgeschwindigkeit zugeordnet werden:

$$v_D = -\frac{e\tau}{m^*} \cdot E$$

Dies kann mit Hilfe der Fermi-Geschwindigkeit $v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m^*}}$ und der mittleren freien Weglänge λ über $\tau = \frac{\lambda}{v_F}$ ausgedrückt werden als:

$$v_D = -\frac{e \lambda}{m^* v_F} \cdot E$$

Mit obiger Form für die Stromdichte \vec{j} folgt hieraus das Ohmsche Gesetz:

$$j = \sigma \cdot E$$

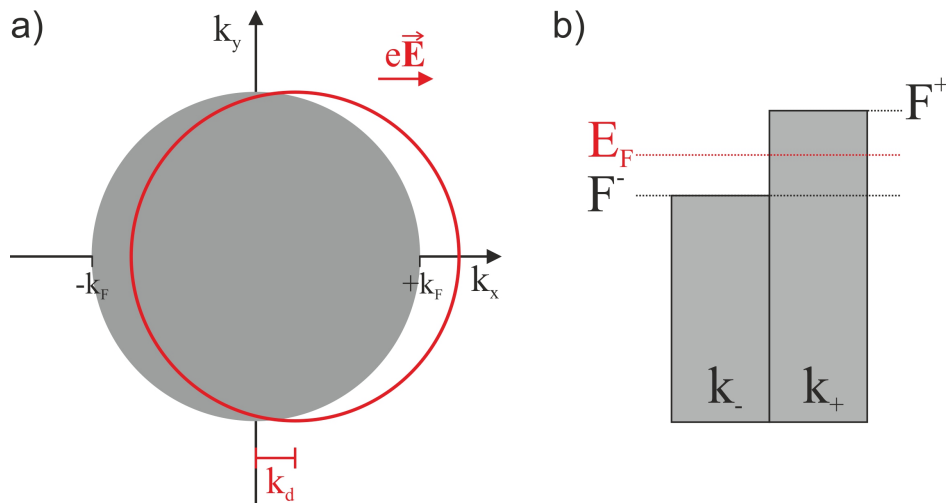


Abbildung 2.6.: a) Alle besetzten Zustände im k -Raum liegen für tiefe Temperaturen innerhalb eines Kreises mit Radius k_F (grau). Mit äußerem elektrischen Feld verschiebt sich dieser Kreis um k_d (rot) in Richtung von eE . b) Definition und Besetzung der Quasi-Fermienergien μ_c^{k+} und μ_c^{k-} . Zum Stromtransport tragen nur die Elektronen aus dem Bereich zwischen den beiden Quasi-Fermienergien bei. Im Bild ist der Netto-Stromtransport von links nach rechts gerichtet.

mit der materialspezifischen elektrischen Leitfähigkeit $\sigma = \frac{n e^2 \lambda}{m^* v_F} = \frac{n e^2 \tau}{m^*}$.

Sommerfeld war es, der die Drude-Theorie soweit anpasste, dass sie nicht mehr im Widerspruch zum Pauli-Prinzip stand. In einem Fermigas können die einzelnen Teilchen aufgrund des Pauli-Prinzips nicht den gleichen Impuls haben. Die Elektronen füllen eine Kugel; der Kugelradius ist der der Fermienergie zugehörige Impuls.

Abbildung 2.6a zeigt die Fermikugel für den thermodynamischen Gleichgewichtszustand (grau) und für den Zustand mit angelegtem elektrischen Feld (rot). Im Gleichgewichtszustand sind alle k -Zustände innerhalb eines Kreises mit Radius k_F und somit bis zur Fermienergie besetzt, also $k < k_F$. Ein äußeres elektrisches Feld \vec{E} verschiebt nun die Kreisfläche um k_d , hier in Richtung $+k_x$. Wenn das elektrische Feld klein genug ist, ändert sich für die Zustände tief in der Fermi-Kugel nichts. Zuvor besetzte Zustände mit $k \ll k_F$ sind jetzt immer noch besetzt. Anders verhält es sich mit den Zuständen bei $k = \pm k_F$. Zustände knapp über $+k_F$ sind ohne externes Feld unbesetzt, mit externem Feld besetzt. Genau umgekehrt stellt sich die Situation bei $-k_F$ dar. Zuvor besetzte Zustände sind plötzlich unbesetzt. Somit kann gesagt werden, dass der fließende Netto-Elektronenstrom nur von

diesem Bruchteil der vorhandenen Elektronen an der Fermikante getragen wird, die sich mit der Fermi-Geschwindigkeit bewegen.

Aufgrund des äußeren elektrischen Feldes und dessen Einfluss, d.h. der Verschiebung der Verteilungsfunktion, werden Quasi-Fermienergien bzw. Quasi-Fermi-level (QFL) F^n statt einer einheitlichen Fermienergie definiert: F^+ für Elektronen, die sich in Richtung $e\vec{E}$ bewegen und F^- für Elektronen, die sich entgegen dieser Richtung bewegen. Gezeigt ist dies in Abbildung 2.6b. Alle Zustände unterhalb F^- sind vollständig besetzt und tragen nicht zum Stromtransport bei. Nur die Zustände zwischen F^- und F^+ tragen zum Nettostrom bei. Gemäß [20] können die beiden Quasi-Fermienergien abgeschätzt werden zu:

$$F^+ \propto \frac{\hbar^2(k_F + k_d)^2}{2m}$$

$$F^- \propto \frac{\hbar^2(k_F - k_d)^2}{2m}$$

Mit $k_d = \frac{eE\tau}{\hbar}$ ⁴. Hier kann eine Energiedifferenz zwischen den beiden Quasi-Fermienergien $F^+ - F^-$ angegeben und darüber eine Länge definiert werden, die mittlere freie Weglänge λ genannt wird:

$$F^+ - F^- \propto \frac{2\hbar^2 k_F k_d}{m} = 2eE v_F \tau = 2eE \lambda$$

Diese Energiedifferenz gewinnt ein Elektron pro mittlerer freier Weglänge λ .

Übertragen auf reale Leiter bzw. Proben kann festgehalten werden: Sobald ein äußeres elektrisches Feld angelegt wird und ein Strom fließt, kann also keine stationäre, konstante Fermienergie, die an jedem Ort der Probe gleich ist, angegeben werden. Gemäß *S. Datta* [20] werden trotz des global herrschenden thermodynamischen Ungleichgewichts kleine Bereiche der Probe definiert, in denen dennoch ein thermodynamisches Gleichgewicht vorliegt. Es wird angenommen, dass die Lage dieser Bereiche im Leiter ortsunabhängig ist, d.h. nicht unterscheidbar. Dies lässt sofort die Aussage zu, dass keine lokalisierten Defekte existieren, die auch die Energiedissipation lokal werden lassen. Die Energiedissipation findet somit nicht lokal statt, sondern im gesamten Leiter. Das ist eine der Kernaussagen des *Drude-Sommerfeld-Modells*. Das elektrochemische Potential folgt in diesem Bild dem elektrostatischen Potential: $\mu_{ec} = -e\Phi(x, y) + \text{const.}$

⁴ $\frac{\hbar k_d}{m^*} = v_d = \frac{eE\tau}{m^*} \Rightarrow k_d = \frac{eE\tau}{\hbar}$

2.2.2. Ballistischer Transport nach Landauer

Um den ballistischen Ladungstransport in einem Leiter zu beschreiben, bedient man sich des *Landauer-Formalismus*, und beschreibt den Strom durch einen Leiter als *Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron den Leiter durchqueren kann* [24, 25, 26]. Büttiker erweiterte diesen Ansatz auf Multi-Terminal-Systeme, genannt *Landauer-Büttiker-Formalismus*.

Als Grund für elektrischen Stromfluss wurde üblicherweise das elektrische Feld angesehen. Im Rahmen des *Landauer-Formalismus* wird der Stromfluss als Konsequenz aus der Injektion von Ladungsträgern durch Kontakte und deren Wahrscheinlichkeit beschrieben, dass andere Ende des elektrischen Leiters zu erreichen [27].

Das Ohmsche Gesetz besagt für (verglichen mit der mittleren freien Weglänge der Ladungsträger) große Probenstrukturen, dass der elektrische Leitwert G^5 beschrieben werden kann als:

$$G = \frac{\sigma A}{L}$$

Hier ist die elektrische Leitfähigkeit σ ein materialspezifischer Parameter, A die Querschnittsfläche des stromtragenden Leiters und L die Länge. Auf kleineren Größenskalen im Bereich der mittleren freien Weglänge muss dieses Gesetz gewisse Änderungen erfahren. Zunächst muss berücksichtigt werden, dass Widerstände im Bereich der Übergänge Kontakt-Leiter, die sogenannten Kontaktwiderstände, auftreten. Diese Beiträge sind unabhängig von der Länge L des Leiters. Darüber hinaus nimmt die Leitfähigkeit nicht linear mit der Querschnittsfläche A ab, sondern reduziert sich in diskreten Einheiten. Landauer hat, um diesen Änderungen Rechnung zu tragen, folgende Gleichung entwickelt (*Landauer-Gleichung*):

$$G = \frac{2e^2}{h} MT \quad (2.6)$$

Der Faktor T gibt hier die mittlere Wahrscheinlichkeit an, mit der ein in einen Leiter injiziertes Elektron bis zum anderen Ende des Leiters transmittiert wird. Der Term $\frac{h}{e^2} = R_K$ ist die *Klitzing-Konstante*⁶. M gibt die Anzahl der transversalen Moden an, die bei einer vorgegebenen Energie den Leitungselektronen im Leiter zur Verfügung stehen. Für $T = 1$ folgt aus 2.6 die Leitfähigkeit des ballistischen Leiters unter der Berücksichtigung der Kontaktwiderstände. Im Rahmen einer Betrachtung ohne den Einfluss der Kontaktwi-

⁵Der elektrische Leitwert G wird berechnet nach $G = R^{-1}$, die Einheit ist Siemens (S).

⁶Klaus von Klitzing erhielt 1985 den Nobelpreis für Physik für die Entdeckung des Quanten-Hall-Effekts. Die nach ihm benannte Klitzing-Konstante $R_K = \frac{h}{e^2} = 25812.807 \Omega$ dient seit 1990 der Definition der Einheit Ω .

derstände würde die Leitfähigkeit eines ballistischen Leiters unendlich groß sein, da er keinen elektrischen Widerstand aufweist. Im Experiment kann das nicht beobachtet werden [28].

Da der vorhandene elektrische Widerstand einen Spannungsabfall nach sich zieht stellt sich die Frage, wo die Energie dissipiert wird. Dies geschieht im Bereich der Kontakte, im Leiter wird keine Energie verloren, da der Transport ballistisch ist. Bei dieser Betrachtung wird vorausgesetzt, dass die Elektronen ohne Reflexion vom Leiter in die Kontakte übergehen können. Die Kontaktwiderstände resultieren aus der Tatsache, dass der Strom innerhalb der Kontakte von unendlich vielen Moden getragen wird. Im Leiter allerdings tragen nur noch wenige Moden zum Stromtransport bei. Der Verlauf des elektrochemischen Potentials im ballistischen Transportbild folgt dem des elektrostatischen Potentials (bis auf das Vorzeichen, vgl. Gleichung 2.5). Im störungsfreien und somit reflexionsfreien, ballistischen Leiter ist das elektrostatische Potential konstant.

Interessant ist in diesem Rahmen, wie sich das elektrochemische Potential an strukturellen Defekten wie Fehlstellen, Domänengrenzen, Stufenkanten etc. verhält. Hier bietet die Rastertunnelpotentiometrie beste Voraussetzungen diesen Verlauf experimentell zu bestimmen. *R. Landauer* postuliert, dass es am Ort des Streuers eine Barriere für Ladungsträger gibt und es zur Ausbildung des sogenannten *Landauer-Widerstandsdipols* kommt [24, 26, 25].

2.2.3. Das elektrochemische Potential im Experiment: $\mu_{ec,STP}$

Wie beschrieben wird das chemische Potential einer stromdurchflossenen Probe in viele Quasi-Fermilevel F^n für die Zustände k_{\pm} überführt. Die resultierenden, ortsabhängigen, elektrochemischen Potentiale $\mu_{ec}^{k_{\pm}}$ ergeben sich gemäß Gleichung 2.5 aus der Summe des lokalen Quasi-Fermilevels $F^n(x, y)$ und des lokalen elektrostatischen Potentials $\Phi(x, y)$ multipliziert mit der Elementarladung:

$$\mu_{ec}^{k_+}(x, y) = F^+(x, y) - e\Phi(x, y) \quad (2.7)$$

$$\mu_{ec}^{k_-}(x, y) = F^-(x, y) - e\Phi(x, y) \quad (2.8)$$

Der Messprozess der Rastertunnelpotentiometrie ist in Abbildung 2.7 illustriert. Die k_{\pm} -Zustände der Tunnelspitze sind gleich besetzt, sie befindet sich im Gleichgewicht. Der

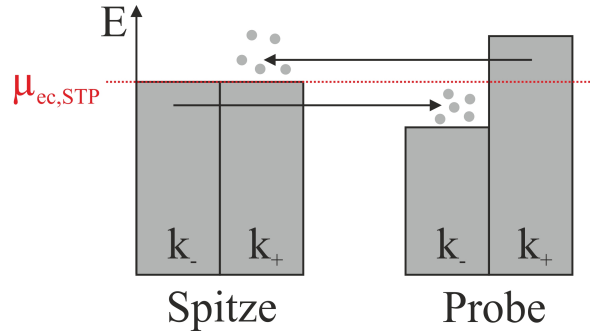


Abbildung 2.7.: Illustration des Messprozesses in der Rastertunnelpotentiometrie: Anpassung des elektrochemischen Potentials der Spitze $\mu_{ec,STP}$ exakt so, dass kein Netto-Stromtransport zwischen Tunnelspitze und Probe existiert. Auf diese Weise wird das chemische Potential der Probe durch die Spitze abgetastet. Basierend auf [21, 20]

externe Potentialregelkreis (vergleiche Kapitel 2.3) stellt das elektrochemische Potential der Tunnelspitze so ein, dass kein Netto-Stromtransport zwischen Spitze und Probe stattfindet. Gemäß [20] kann der Mittelwert

$$\mu_{ec,STP} = \frac{F^+ + F^-}{2} \quad (2.9)$$

als Messgröße verwendet werden. Die Größe $\mu_{ec,STP}$ wird als zentrale Messgröße der Rastertunnelpotentiometrie verwendet.

Für *diffusen Ladungstransport* im untersuchten Leiter ergibt sich eine lineare Proportionalität zum elektrostatischen Potential $\Phi(x, y)$ im Leiter:

$$\mu_{ec,STP} = \frac{F^+ + F^-}{2} = -e\Phi(x, y) + const.$$

Im Falle des *ballistischen Transports* stellt sich der Zusammenhang komplexer dar. Auch an dieser Stelle sei wieder auf die Arbeit *S. Dattas* verwiesen, in der das Problem ausführlich diskutiert wird [20].

In Abbildung 2.8 ist der laterale Verlauf des elektrostatischen Potentials Φ , des elektrochemischen Potentials $\mu_{ec,STP}$ und der Quasi-Fermienergien F^n beim Übergang über bzw. beim Streuprozess an einer Tunnelbarriere mit Transmission T schematisch dargestellt. Eine solche Barriere kann z.B. ein Punktdefekt in einem linearen Leiter oder eine Stufenkante in einem zweidimensionalen Leiter sein.

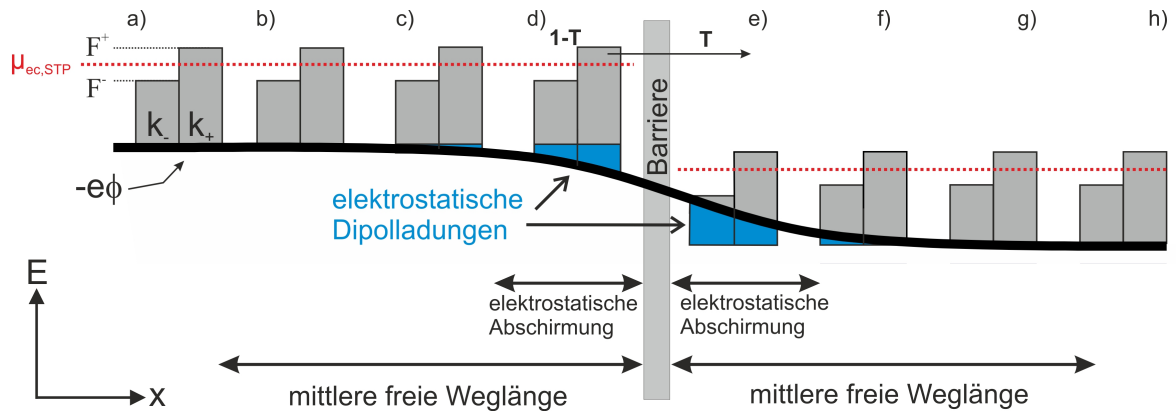


Abbildung 2.8.: Schematische Darstellung von elektrostatischem Potential Φ , elektrochemischem Potential $\mu_{ec,STP}$ und der Quasi-Fermienergien F^n beim Übergang über eine Tunnelbarriere mit Transmission T . Basierend auf [20, 21].

Die Kontaktbereiche des Leiters (a, h) werden nicht näher betrachtet und es wird davon ausgegangen, dass die Besetzungen in k_{\pm} wie illustriert vorliegen. Aufgrund der k -Besetzungen resultiert ein Netto-Stromtransport von links nach rechts. Elektronen der k_{+} -Zustände bewegen sich von a) kommend auf die Barriere zu und werden dort mit der Wahrscheinlichkeit T von d) nach e) transmittiert. An der Barriere reflektierte Elektronen bilden die einzige Quelle für Elektronen auf der linken Seite mit k_{-} . Die transmittierten Elektronen in e) bilden die Quelle für k_{+} -Elektronen auf der rechten Seite der Barriere. k_{-} -Elektronen, die von rechts (h) auf die Barriere zulaufen, werden hier zu 100% reflektiert. Weit entfernt von der Barriere, außerhalb der sogenannten Abschirmlänge, ist das elektrostatische Potential Φ konstant. Die Abschirmlänge ist im konkret betrachteten Problem eine wichtige Größe. Bringt man in einen metallischen Leiter eine zusätzliche elektrische Ladung ein, wird in der näheren Umgebung der eingebrachten Ladung die ansonsten homogene Elektronenkonzentration gestört. Diese Störung kompensiert oder schirmt das elektrische Feld der eingebrachten Ladung ab, dass innerhalb dieser Abschirmlänge abfällt. Die Abschirmlänge ist in Metallen einige \AA groß, in Halbleitern kann sie bis zu einige hundert \AA groß sein [20].

Die Quasi-Fermienergie F^{\pm} variiert am Ort der Barriere stark. Dies führt dazu, dass auch das elektrostatische Potential variieren muss, um die Änderung der Quasi-Fermienergie zu kompensieren. Die Änderung der Quasi-Fermienergie geschieht allerdings so abrupt, dass das elektrostatische Potential nicht folgen kann. Als Resultat sind Quasi-Fermienergie und elektrostatisches Potential auf dieser Längenskala voneinander separiert. Abbildung

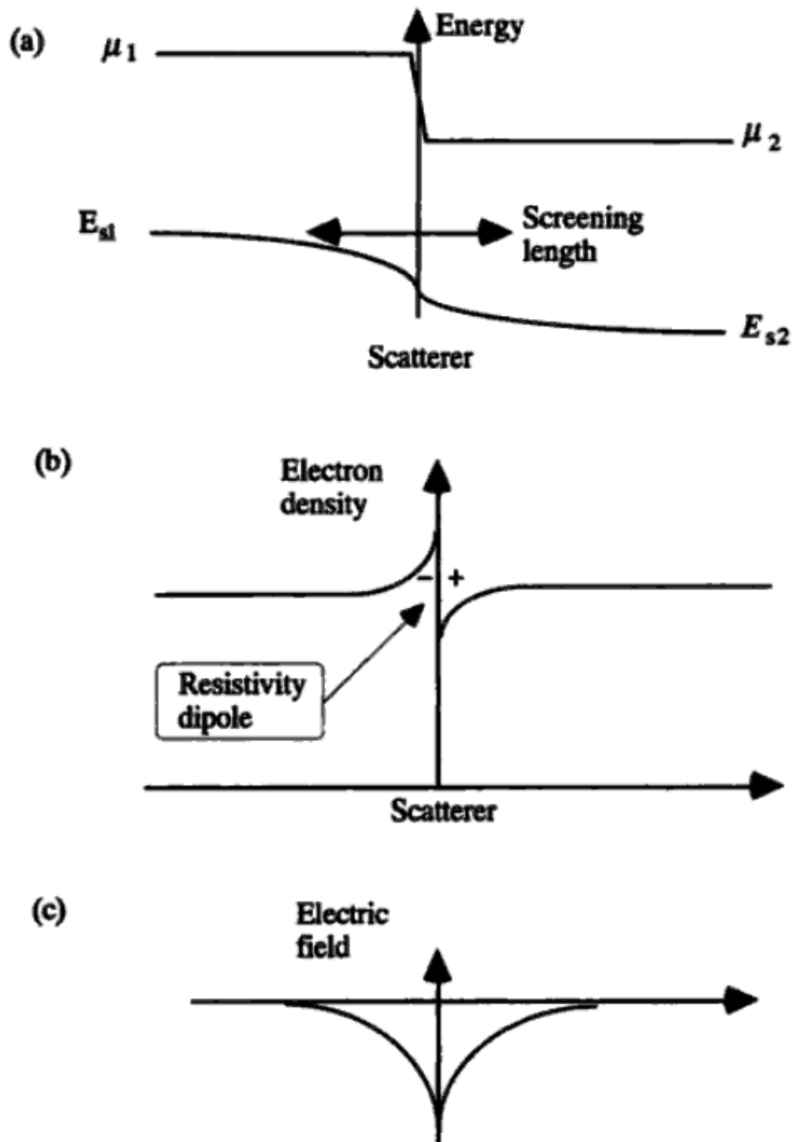


Abbildung 2.9.: Abbildung von S. Datta [20]. Gezeigt ist das Verhalten a) des elektrochemischen Potentials und des elektrostatischen Potentials ($E_s = -e\Phi$, *screening length*, engl. Abschirmlänge), b) der Elektronendichte und c) des elektrischen Feldes in der Nähe eines Streuers.

2.9 zeigt hierzu den Verlauf des elektrochemischen Potentials und des elektrostatischen Potentials (a), der Elektronendichte (b) und des elektrischen Feldes (c) in der Nähe der streuenden Barriere.

Doch warum vollzieht die Quasi-Fermienergie an der Barriere einen so starken Sprung? Die Quasi-Fermienergie kann als Maß für die Anzahl von Elektronen betrachtet werden. Im Bild des ballistischen Transports nach S. Datta herrscht um die Barriere herum eine stark inhomogene Ladungsverteilung. Vor der Barriere liegt eine große Anzahl von Elektronen vor, die auf die Barriere zu laufen. Beim Übergang über die Barriere wird diese Zahl dezimiert, da nur ein Teil der Elektronen aufgrund der Transmissionswahrscheinlichkeit T die Barriere passieren kann. Hinter der Barriere befinden sich demnach weniger Elektronen als vor der Barriere. Auf diese Weise bildet sich ein Ladungsdipol um die Barriere aus, der sogenannte Landauer-Widerstandsdipol. Dies ist in Abbildung 2.9 gezeigt.

Wie erwähnt kann das elektrostatische Potential im Bereich der Abschirmlänge nicht dem Verlauf der Quasi-Fermienergie folgen und damit die Elektronendichte $\rho(r)$ nicht konstant halten. Die Ladungsträgerdichte ist über die Poisson-Gleichung $\Delta\Phi(\vec{r}) = -\frac{\rho(r)}{\epsilon_0}$ mit dem elektrostatischen Potential verbunden.

Eine Änderung des elektrostatischen Potentials erfordert ein elektrisches Feld. Für die Ausbildung eines elektrischen Feldes wird eine inhomogene Ladungsverteilung benötigt. Genau diese inhomogene Ladungsverteilung findet man im Bereich der Abschirmlänge um die Barriere herum, den Landauer-Widerstandsdipol. Er gilt als elementarer Beitrag zum makroskopisch beobachtbaren elektrischen Widerstand und hat damit eine immense Bedeutung für das Verständnis von elektronischem Transport in einem Leiter.

2.3. Rastertunnelpotentiometrie (STP)

Das im vorhergehenden Kapitel vorgestellte elektrochemische Potential $\mu_{ec,STP}$ ist die zentrale Messgröße der Rastertunnelpotentiometrie. Mittels Rastertunnelpotentiometrie (STP, engl. scanning tunnelling potentiometry) wird das elektrochemische Potential mit Hilfe einer schwach an das Elektronensystem der Probe ankoppelnden STM-Spitze auf atomarer Skala vermessen. Das elektrochemische Potential variiert lokal aufgrund struktureller Defekte in der Probenoberfläche. Die genaue Kenntnis des Verlaufs des elektrochemischen Potentials erlaubt es zu untersuchen, wie $\mu_{ec,STP}$ mit diesen Defekten zusammenhängt und in der Umgebung verläuft.

Das Messprinzip der Rastertunnelpotentiometrie entspricht einer Drei-Sonden-Erweiterung der Rastertunnelmikroskopie und wurde 1986 von *P. Muralt* und *D. Pohl* vorgestellt [29]. Zwei Spitzen des STM kontaktieren die Probenoberfläche und erzeugen eine Potentiallandschaft, indem eine Querspannung aufgeprägt wird, die dritte Spitze rastert im Tunnelkontakt über die Oberfläche. Die STP erweitert somit das klassische STM um die Möglichkeit, neben der Topografie das lokale elektrochemische Potential an der Position der Tunnelspitze atomar genau und simultan zu messen.

Die Methode STP wurde an unterschiedlichen Oberflächen angewandt, unter anderem wurde der elektronische Transport durch das zweidimensionale Elektronengas der Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag Oberfläche analysiert [4]. Hier konnte auf atomarer Skala gezeigt werden, wie sich das elektrochemische Potential beim Übergang über Stufenkanten und Domängengrenzen verhält. *Briner et al.* haben das elektrochemische Potential in der Umgebung von strukturellen Defekten in dünnen Bismutfilmen vermessen [30]. Aufgrund der Aktualität und im Zusammenhang mit dem Nobel-Preis für Physik 2010⁷ sei die Arbeit von *Ji et al.* an epitaktisch gewachsenem Graphen explizit erwähnt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der elektrische Transport auf atomarer Skala in Graphenschichten untersucht [31].

Darüber hinaus ist die Messung des elektrochemischen Potentials mittels STP auch empfindlich auf Thermospannungen im Tunnelkontakt. Hierbei handelt es sich um ein additives, aus einem Temperaturunterschied zwischen Tunnelspitze und Probe resultierendes, Spannungssignal, das dem elektrochemischen Potential der Oberfläche überlagert ist. Die Interpretation dieser Thermospannungssignale erlaubt unter anderem Rückschlüsse auf die

⁷Der Nobelpreis für Physik 2010 wurde für „bahnbrechende Experimente am zweidimensionalen Material Graphen“ an A. Geim und K. Novoselov vergeben [16].

lokale Zustandsdichte der Probe [32] (siehe Kapitel 2.4).

Die Methode der Rastertunnelpotentiometrie stellt besondere Ansprüche an den experimentellen Aufbau. Der in dieser Arbeit verwendete Aufbau ist in [34, 33, 35] detailliert erläutert.

Um das elektrochemische Potential einer leitenden Oberfläche zu messen, werden zunächst zwei Elektroden, in unserem Fall STM-Spitzen, in Kontakt mit der Oberfläche gebracht [34, 33]. Diese Kontakte, in Abbildung 2.10a mit 1 und 2 bezeichnet, prägen eine Potentialdifferenz zwischen zwei Punkten auf: $\Delta U = U_2 - U_1$. Es bildet sich eine Potentiallandschaft auf der Probenoberfläche aus. Das lokale Potential an der Oberfläche der Probe unterliegt jetzt, im Gegensatz zur normalen Rastertunnelmikroskopie, Einflüssen der zusätzlich eingeprägten Querspannung.

Man bedient sich zur Bestimmung des Potentials der Oberfläche am Ort der Tunnelspitze (3) einer Widerstandsmessbrücke. Abbildung 2.10b zeigt dazu den schematischen Aufbau. Ein Zweig der Widerstandsbrücke ist durch das Potentiometer gegeben (Widerstände R_1 und R_2). Der andere Zweig der Widerstandsmessbrücke wird durch die Probe gegeben, mit Abgriff durch die Tunnelspitze (Widerstände R_3 und R_4). Zur Aufnahme einer Potentialkarte simultan zur Topografie der Probe wird zunächst die Brücke so abgeglichen, dass kein messbarer Tunnelstrom, d.h. kein Brückenstrom, mehr fließt⁸. Das ist genau dann erreicht, wenn gilt:

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{R_3}{R_4}$$

Dieser Abgleich erfolgt über ein Potentiometer. Stationär betrachtet fließt nun zwischen Tunnelspitze und Probe kein gerichteter Tunnelgleichstrom mehr; die Tunnelspitze liegt auf dem gleichen elektrischen Potential wie die Probe an dieser Stelle.

Hier muss erwähnt werden, dass dies im Falle des STM-Betriebs zu Problemen führen wird: Versucht die Höhenregelung im Konstant-Strom-Modus ihren Sollwert zu erreichen, d.h. einen gewählten Tunnelstrom zu erreichen, der aber laufend auf null abgeglichen wird, resultiert dies in einer Kollision von Tunnelspitze und Probenoberfläche und in der Zerstörung der zu untersuchenden Probenstelle und der Spitze. Dies gilt es zu vermeiden. Dazu wird eine (sinusförmige) Modulationsspannung U_{mod} verwendet mit einer Frequenz im kHz -Bereich und einer Amplitude von einigen mV . Die aufmodulierte Wechselspannung ist im zeitlichen Mittel null und führt dazu, dass der Tunnelstrom jetzt neben dem Gleichstrom auch einen Wechselstromanteil hat. Für die Höhenregelung wird der Wechselstromanteil

⁸Abgesehen vom thermischen Rauschen des Tunnelstroms bei null Tunnelspannung [36, 37, 38, 39].

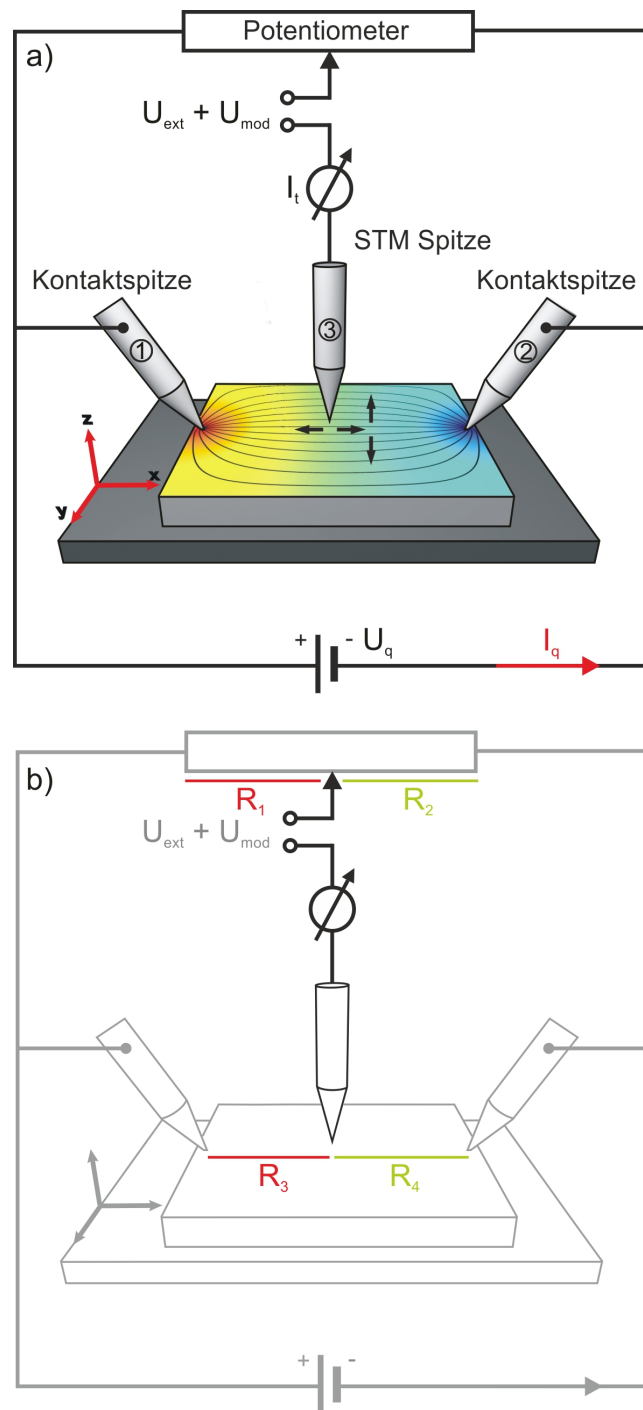


Abbildung 2.10.: Schematischer Aufbau der Rastertunnelpotentiometrie. a) Zwei Spitzen des STM (1 und 2) kontaktieren eine leitfähige Probe, die Tunnelspitze (3) rastert im Tunnelabstand über die Oberfläche. Die Spannung U_q erzeugt einen Querstrom I_q über die Probe. b) Schematische Darstellung der Brückenschaltung. Basierend auf [33].

des Tunnelstroms gleichgerichtet, logarithmiert und verstärkt. Der Betrag dieses Wechselstromanteils (ist ungleich null und) kann zur Höhenregelung verwendet werden, da dieser ebenfalls exponentiell vom Abstand zwischen Spitze und Probe abhängt. Die Regelung versucht, diesen Wechselstromanteil im Tunnelstrom konstant zu halten. Damit kann bei einer Potentialdifferenz von null und bei einem Gleichstromanteil des Tunnelstroms von null, da abgeglichen, die STM-Topografie gemessen werden. Die Potentiale von Tunnelspitze und Probe werden durch sie nicht gestört und damit beeinflusst die Modulationsspannung auch nicht das gemessene elektrochemische Potential der Probenoberfläche.

Anspruchsvoller für die Elektronik ist es, wenn nun dynamisch über die Oberfläche gerasert wird und der Tunnelstromabgleich (Ausgleich der Widerstandsbrücke) an jeder Stelle der Probe dynamisch erfolgen muss. Dies kann nicht mehr am Potentiometer von Hand geschehen, sondern erfolgt über eine (Potential-)Regelung. Um den Tunnelstrom an jedem Ort auf null abzugleichen bedient man sich der zusätzlichen externen Spannung U_{ext} , wie in Abbildung 2.10 eingezeichnet. Unter Berücksichtigung dieser externen Spannung kann der Tunnelstrom I_t geschrieben werden als:

$$I_t = \sigma_t \cdot [U(x, y) + U_{ext} + U_{mod}] \quad (2.10)$$

σ_t ist hier die elektrische Leitfähigkeit des Tunnelkontakts. Der Tunnelstrom soll an jeder Stelle x, y im zeitlichen Mittel durch die Gleichspannung U_{ext} auf null abgeglichen werden:

$$I_t = \sigma_t \cdot \langle [U(x, y) + U_{ext} + U_{mod}] \rangle = 0$$

Dies führt zu folgender Gleichung:

$$0 = U(x, y) + U_{ext} + \langle U_{mod} \rangle$$

und umgeformt zu

$$-U_{ext} = U(x, y) + \langle U_{mod} \rangle$$

Die Wechselspannung ist im zeitlichen Mittel null und verfälscht das Potentialsignal nicht:

$$U(x, y) = -U_{ext} \quad (2.11)$$

Damit ist das lokale Potential $U(x, y)$ an jeder Stelle direkt durch die externe Spannung

U_{ext} zugänglich, die die Spannungsdifferenz zwischen Tunnelspitze und Probe ausgleicht. Nutzt man dies und setzt die Beziehung 2.11 in Gleichung 2.10 ein folgt direkt

$$I_t = \sigma_t \cdot (U(x, y) + U_{ext} + U_{mod}) = \sigma_t \cdot U_{mod} \propto e^{-2\kappa d} \cdot U_{mod} \neq 0 \quad (2.12)$$

und zeigt die exponentielle Abhängigkeit dieses verbleibenden Stroms vom Tunnelabstand d . Er kann demnach zur Höhenregelung der Spitze verwendet werden.

Etwas Vorsicht ist in Bezug auf die beiden Regelkreise geboten. Die Höhenregelung hängt über den Potentialabgleich (siehe Gleichung 2.10 und 2.11) vom Potentialregelkreis ab. Gleichzeitig hängt aber auch die Potentialregelung über die Abstandsabhängigkeit des verbleibenden Wechselstromanteils (siehe Gleichung 2.12) von der Höhenregelung ab. Daher muss bei der Durchführung von STP-Experimenten auf die Hierarchie der Regelungen geachtet werden. Im vorliegenden Messaufbau wird die Höhenregelung ca. zehn mal so schnell betrieben wie die Potentialregelung.

2.4. Thermospannungsbeitrag zum elektrochemischen Potential

Bereits leicht unterschiedliche Temperaturen von Tunnelspitze und Probe bei unterschiedlichen Materialien führen zu einer kleinen Spannungsdifferenz zwischen diesen. Diese Spannungsdifferenz wird Thermospannung genannt und kommt aufgrund des thermoelektrischen Seebeck-Effekts zustande. Der Seebeck-Effekt beschreibt die direkte Umwandlung von Temperaturunterschieden in elektrische Spannung. Man betrachtet einen Leiter, dessen Enden unterschiedliche Temperaturen aufweisen. Dieser Temperaturunterschied erzeugt Diffusionsströme: Ladungsträger mit höherer Energie diffundieren vom warmen Ende des Leiters zum kalten, Ladungsträger mit niedriger Energie vom kalten zum warmen. Wird der Temperaturunterschied aufrecht erhalten, d.h. dem System wird nicht gestattet, das thermodynamische Gleichgewicht einzustellen, bleiben die Diffusionsströme erhalten. Sind beide Diffusionsströme gleich groß, resultiert kein Nettostrom in eine der Richtungen. Durch energieabhängiges Streuen der Ladungsträger können sich die Diffusionsströme unterscheiden und ein Nettostrom resultieren, der an einem Ende des Leiters eine höhere Ladungsträgerkonzentration und damit eine elektrostatische Spannung verursacht. Diese Spannung wird Seebeck-Spannung genannt.

Erste Experimente im Bereich der Thermospannungsmessung mit dem STM wurden von *C.C. Williams* und *H.K. Wickramasinghe* durchgeführt [40]. Weitergehende experimentelle Arbeit wurde von *R. Möller et al.* geleistet [41, 42, 39, 43]. Theoretische Ansätze hierzu kamen von *C.R. Leavens* und *G.C. Aers* [44] und *J.A. Støvneng* und *P. Lipavský* [45].

Die Methode der STP ist sensitiv auf Thermospannungen, da die Thermospannung auf dem Gradienten des elektrochemischen Potentials beruht (hier bezogen auf die Vakuumbarriere). Thermospannungssignale können folglich die Interpretation des gemessenen Potentialverlaufs erschweren. Hier soll kurz erläutert werden, wie sich Thermospannungen in der Rastertunnelmikroskopie auswirken [40, 39, 43].

Die Thermospannung zwischen Tunnelspitze und Probe lässt sich gemäß [45, 39] ausdrücken als:

$$U_{thermo} = \frac{\pi^2 k_B^2}{6e} (T_{Spitze}^2 - T_{Probe}^2) \cdot \left(\frac{\partial(\ln \rho_{Spitze}(0))}{\partial E} + \frac{\partial(\ln \rho_{Probe}(x,y,0))}{\partial E} + \frac{z}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\Phi}} \right)$$

Hier sind $T_{Spitze,Probe}$ die Temperaturen von Tunnelspitze und Probe, $\rho_{Spitze,Probe}$ die elektronischen Zustandsdichten von Spitze und Probe an der Fermienergie E_F , z der Ab-

stand zwischen Tunnelspitze und Probe und Φ die mittlere effektive Austrittsarbeit.

Der erste **Term** besagt, dass die Thermospannung abhängig ist von der Temperaturdifferenz und den mittleren Temperaturen von Spitze und Probe. Spitze und Probe stehen nicht in direktem Kontakt miteinander, sondern sind durch die Vakuumbarriere getrennt. Dies führt zu einem größeren Betrag von U_{thermo} im Vergleich zu Experimenten an Luft oder gar im Kontakt.

Der zweite **Term** spiegelt die Abhängigkeit der Thermospannung von der Ableitung der elektronischen Zustandsdichte der Tunnelspitze bei E_F wieder. Der Term wird konstant, wenn sich ρ_{Spitze} während der Messung nicht ändert.

Der dritte **Term** macht deutlich, dass eine laterale Änderung der elektronischen Zustandsdichte der Probe ρ_{Probe} auch eine Änderung des Thermospannungssignals hervorruft. Hier seien zum Beispiel atomare Stufenkanten und Korngrenzen erwähnt.

Der letzte **Term** wird als konstant angenommen, da der Abstand z zwischen Tunnelspitze und Probe im Konstanter-Strom-Modus nur wenig veränderlich ist.

Die Rastertunnelpotentiometrie ist zusätzlich zum elektrochemischen Potential also auch auf Potentiale empfindlich, die ihren Ursprung in der Thermospannung U_{thermo} haben. Für eine korrekte Interpretation der Messdaten im STP-Modus muss somit der Beitrag der Thermospannung erkannt und berücksichtigt werden. Die einfachste Vorgehensweise zur Erkennung von Thermospannungsbeiträgen im Rahmen der Rastertunnelpotentiometrie ist schlicht die Umkehrung der Polarität der Querspannung. Effekte, die aufgrund dieser Querspannung auftreten, werden eine Reaktion darauf zeigen. Thermospannungsbeiträge allerdings bleiben unverändert und können so erkannt werden.

2.5. Elektromigration auf mikroskopischer Skala

Als Elektromigration bezeichnet man die induzierte Bewegung von Atomen unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes und des resultierenden Stromflusses; anders ausgedrückt die gerichtete Diffusion von Atomen unter dem Einfluss einer treibenden Kraft [7, 9, 46, 47, 2, 3, 48, 10, 49]. Die thermische, atomare Diffusion hingegen ist ein zufälliger Vorgang, der nicht gerichtet ist, dementsprechend keine Vorzugsrichtung hat. Getrieben wird die Elektromigration durch zwei fundamentale Mechanismen:

i. Impulsübertrag von Leitungselektronen an die Atomrümpfe im metallischen Leiter und deren daraus resultierende Bewegung.

ii. Die durch ein anliegendes elektrisches Feld initiierte Bewegung der Atomrümpfe.

Ersteres wird Windkraft (F_{wind}) genannt. 1914 sprach *Skaupy* erstmals von einem Elektronenwind, der auf die Atomrümpfe eines Festkörpergitters durch den Impulsübertrag von Ladungsträgern bei der Kollision wirkt [7].

Letzteres bezeichnet man als Direktkraft (F_{direkt}) und beschreibt das Angreifen eines externen elektrischen Feldes an die positiv geladenen Atomrümpfe [50, 51, 46]. Diese beiden Kräfte gelten als die treibenden Kräfte der Elektromigration und sollen daher genauer erläutert werden.

Abbildung 2.11 zeigt schematisch, wie diese beiden Kräfte relativ zum Festkörpergitter orientiert sind und wo diese angreifen. An das metallische Festkörpergitter wird ein elektrisches Feld gelegt; die Elektronen bewegen sich im Bild von links nach rechts.

Als Stromrichtung wird in dieser Arbeit die tatsächliche Bewegungsrichtung der Elektronen definiert. Oft wird im Zusammenhang mit der Elektromigration die technische Stromrichtung gewählt, was hier nicht der Fall ist.

Die effektive Bewegungsrichtung der Atome/des Leitermaterials bei (strominduzierter) Elektromigration setzt sich immer aus beiden Kräften zusammen und es gilt herauszufinden, welche Kraft die dominierende ist. Die durch die Windkraft induzierte Bewegung der Atomrümpfe ist in Richtung der Elektronenbewegung gerichtet, d.h. morphologische Änderungen/Materialtransport geschehen in Richtung des Stromflusses. Dagegen ist die Bewegung bei dominierender Direktkraft entgegen der Stromrichtung an der Richtung des elektrischen Feldes orientiert. Die auf ein Festkörperion wirkende resultierende Kraft F_{EM} ist

$$F_{EM}^{\vec{}} = |e| Z^* \vec{E} = |e| (Z_{wind} + Z_{direkt}) \vec{E} = |e| (Z_{wind} + Z_{direkt}) \vec{j} \rho$$

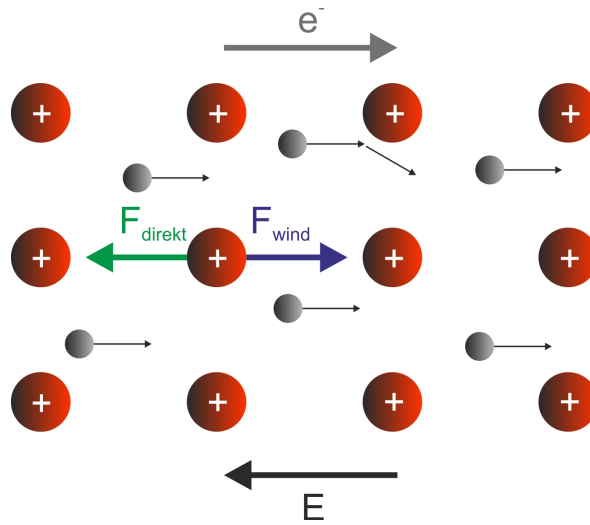


Abbildung 2.11.: Die die Elektromigration bestimmenden Kräfte und ihre Orientierung im stromdurchflossenen metallischen Festkörpergitter: Windkraft und Direktkraft.

Hier wird Z^* die effektive Valenz genannt, \vec{E} ist das angelegte, äußere elektrische Feld, \vec{j} die elektrische Stromdichte und ρ der spezifische Widerstand [52]. Der Parameter „effektive Valenz“ beinhaltet quantenmechanische Effekte der Elektromigration und kann sowohl theoretisch als auch experimentell bestimmt werden [7, 53, 54, 55, 56, 50, 57]. In der Arbeit von *Lodder* und *Dekker* findet sich eine Auflistung von experimentell bestimmten und berechneten Werten der effektiven Valenz von Metallen, die häufig in integrierten Schaltkreisen verwendet werden [57, 58].

Die effektive Valenz $Z^* = (Z_{wind} + Z_{direkt})$ ist dimensionslos und materialabhängig [7]. Die übliche Konvention gibt vor, dass negative Werte von Z^* einen Windkraft-dominierten Prozess beschreiben, d.h. Material bewegt sich von der Kathode zur Anode. Positive Werte beschreiben dementsprechend den gegenläufigen Prozess und ein Vorherrschen der Direktkraft (siehe Tabelle 2.1).

Um die Diffusion in einem metallischen Festkörper unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes zu beschreiben, betrachtet man die (der Ladungsträgerdiffusion analoge) Leerstellendiffusion [49]. Der Leerstellenstrom J ist nach [9] gegeben durch:

$$J = \frac{Dc}{k_B T} \cdot e j \rho Z^* - D \frac{\delta c}{\delta x} \quad (2.13)$$

Werte von Z^*	Bewegungsrichtung des Materials	vorherrschende Kraft
negative Werte	Kathode \longrightarrow Anode	Windkraft
positive Werte	Kathode \longleftarrow Anode	Direktkraft

Tabelle 2.1.: Übersicht über die effektive Valenz Z^* .

Hier sind J der Leerstellenstrom in m^2/s , D die Diffusionskonstante, c die Leerstellenkonzentration in m^{-3} , T die Temperatur in K , j die elektrische Stromdichte, ρ der spezifische Widerstand und Z^* die effektive Valenz.

Die Diffusionskonstante D ist gegeben durch

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{k_B T}}.$$

D_0 ist die Diffusionskonstante bei $T = 0^\circ C$ und E_a ist hier die Aktivierungsenergie der Diffusion.

Der erste Term in Gleichung 2.13 beschreibt die Bewegung der Atome resultierend aus einer angreifenden Kraft. Ob Wind- oder Direktkraft dominiert, d.h. welche Richtung diese Kraft hat, beschreibt Z^* .

Der zweite Term $-D \frac{\delta c}{\delta x}$ trägt der Tatsache Rechnung, dass ein Konzentrationsgradient der Leerstellen berücksichtigt werden muss, der aus der gerichteten Bewegung der Leerstellen resultiert. Diese Erhöhung der Leerstellenkonzentration erzeugt einen rückwärts gerichteten Strom der Atome gemäß dem 1. Fickschen Gesetz. Der Ausdruck $\frac{\delta c}{\delta x}$ beschreibt eben diesen Konzentrationsgradienten.

Auf diese Weise lässt sich die Ladungsträgerdiffusion und damit auch die Elektromigration im metallischen Festkörper beschreiben.

3. Experimenteller Aufbau

3.1. Das Multiprobe UHV-System: Analyse- und Präparationskammer

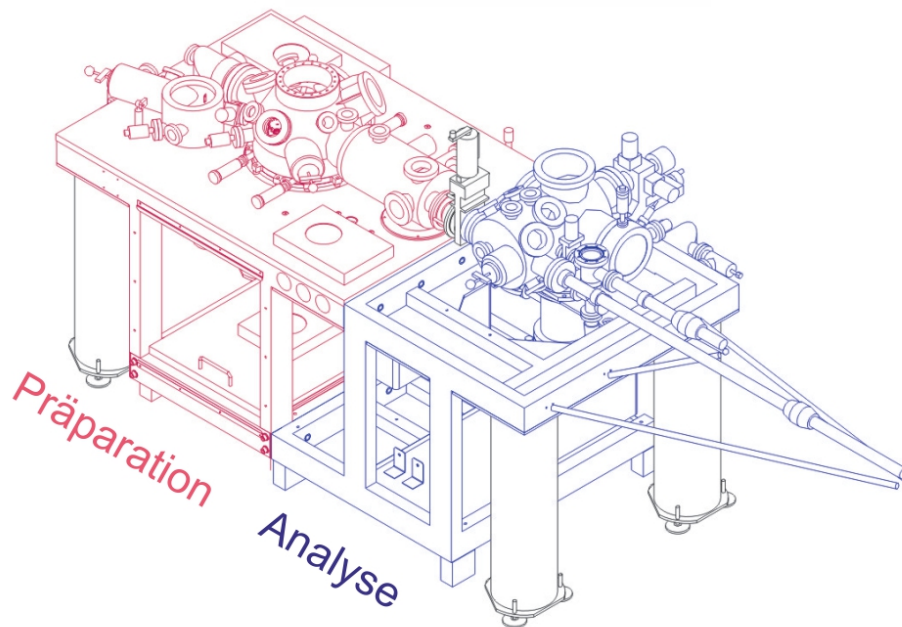
Für die Experimente in dieser Arbeit wurde ein stark an die individuellen Bedürfnisse angepasstes *Nanoprobe*-System der Firma *Omicron Nanotechnology GmbH* verwendet [59]. Das Instrument bietet vier getrennt voneinander operierende Rastertunnelmikroskope und jedes bietet atomare Auflösung. Die vier Rastertunnelmikroskope können simultan auf der gleichen Probe arbeiten und greifen auf denselben Bereich auf der Probe zu. Damit sie atomare Auflösung liefern wurden zum Teil erhebliche Modifikationen durchgeführt, die in den Dissertationen von C.A. Bobisch [60] und A. Bannani [35] bereits dokumentiert sind. Der Grundaufbau besteht aus zwei UHV-Kammern: der Analyse- und der Präparationskammer für die Präparation und erste strukturelle Untersuchungen der verwendeten Proben. Beide Kammern werden im UHV betrieben bei Basisdrücken um $1 \cdot 10^{-10}$ mbar. Ein Ventil trennt Analyse- und Präparationskammer voneinander und erlaubt so eine *in situ* Präparation und Untersuchung der Proben. Abbildung 3.1 zeigt den Grundriss des Instruments, farblich unterschieden sind die beiden Kammern.

3.1.1. Präparationskammer

Die in Abbildung 3.1 rot dargestellte Präparationskammer erlaubt die Präparation der Proben und eine erste strukturelle Charakterisierung. Über die angeflanschte Schleusenkammer können Proben in die Präparationskammer und damit in das Ultrahochvakuum transferiert werden. Im Folgenden soll die Ausstattung der Präparationskammer genauer vorgestellt werden:

- **Präzisionsmanipulator** Er ist die zentrale Einheit der Präparationskammer und bietet die Möglichkeit, die Probentemperatur im Bereich von 130...900 K mit Hilfe

Nanoprobe-System (perspektivische Ansicht)



Nanoprobe-System (Aufsicht)

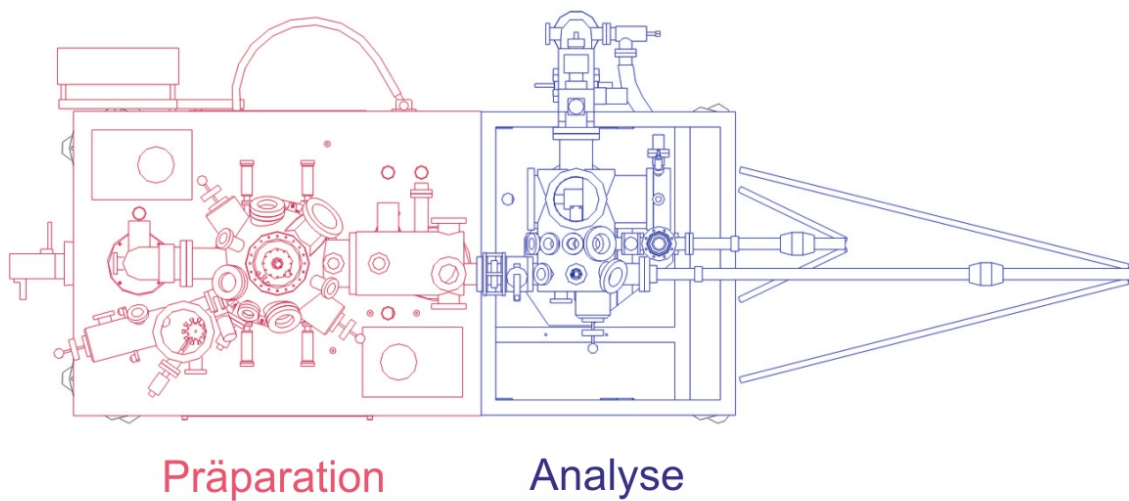


Abbildung 3.1.: Grundriss des Nanoprobe-Systems. Aus [59].

einer Widerstandsheizung zu variieren. Je ein Thermoelement in der Nähe der Probe und in der Nähe des Stickstoff-Kryostaten geben Auskunft über die Temperaturen. Über eine spezielle Halbleiter-Probenträgerkonstruktion (siehe Abbildung 3.2) ist es möglich, Halbleitereinkristalle mit Hilfe eines Direktstroms theoretisch bis zum Schmelzpunkt zu erhitzen. Diese speziellen Probenträger wurden in der Arbeitsgruppe von Prof. Möller konstruiert und bieten zwei voneinander isolierte Kontakte, um die Probe via Direktstrom heizen zu können. Des Weiteren werden für die Fixierung der Einkristalle keine Muttern oder Gewindestangen benötigt, die im späteren Verlauf die Bewegungsmöglichkeiten der STM-Einheiten über der Probe einschränken würden. Stattdessen werden die Proben über Tantal-Bleche federnd eingeklemmt und gleichzeitig kontaktiert. Die Temperaturmessung während des Direktstrombetriebs erfolgt (oberhalb von 620 K) über ein Pyrometer, das von außerhalb der Kammer durch ein Fenster auf die Probe sieht.

Die Probenträger erlauben außerdem die Fixierung einer Schattenmaske unmittelbar über der Probenoberfläche. So können beliebige Strukturen aufgedampft werden.

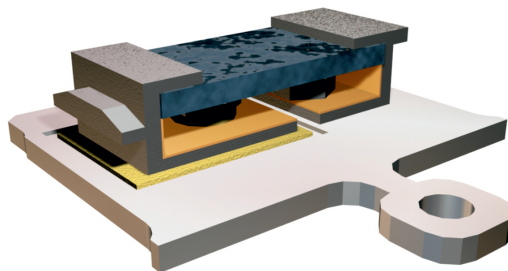


Abbildung 3.2.: Modell des Halbleiter-Probenträgers, aus [35].

- **Metallverdampfer** Die Präparationskammer bietet auch Platz für zwei per Elektronenstoß geheizte Metallverdampfer. Diese sind unterhalb des Präzisionsmanipulators angeordnet. Sie erlauben das Verdampfen von den in dieser Arbeit verwendeten Metallen wie Gold, Silber oder auch Indium. Zusätzlich angebrachte metallische Ablenkplatten mit einem angelegten elektrischen Feld lenken geladene Ionen aus dem erzeugten Teilchenfluss ab, um zu verhindern, dass diese die Probe erreichen. Einer der beiden Metallverdampfer ist schleusbar verbaut und erlaubt so den schnellen und

unkomplizierten Wechsel des zu verdampfenden Materials.

- **Molekülverdampfer** Ein Molekülverdampfer beherbergt drei Tiegel für beispielsweise PTCDA-, PTCDI- oder auch C_{60} -Moleküle. Dieser ist wichtig für die parallel laufenden Experimente der *Ballistischen Elektronen Emissions Mikroskopie* (siehe exemplarisch [61, 62, 63, 33, 60, 64]). Der Molekülverdampfer wurde in dieser Arbeit nicht verwendet.
- **Schwingquarz** Über der Probe ist ein Schwingquarz positioniert, der die Kalibrierung der Aufdampfmenge ermöglicht.
- **Quadrupolmassenspektrometer** Das an der Präparationskammer angebrachte Quadrupolmassenspektrometer detektiert atomare Massen bis 1024 amu und dient der Analyse des Restgases und dem Nachweis, dass die gewünschte Spezies in genügender Reinheit verdampft wird.
- **LEED** Das in Kapitel 3.2 genauer beschriebene LEED (engl., low energy electron diffraction) dient einer ersten strukturellen Analyse und Charakterisierung der reinen oder auch bereits bedampften Probenoberflächen. Mittels CCD-Kamera können die Beugungsbilder aufgenommen werden.
- **Sputtergun (Ionenätzen)** Die Sputtergun wird für die Reinigung von Probenoberflächen eingesetzt. Dies geschieht durch den Beschuss der Oberfläche mit Ar^+ -Ionen und anschließendem Heizen der Probe. Der Ar -Partialdruck beträgt während des Ionenätzens ca. $1.5 \cdot 10^{-5}\text{ mbar}$.
- **Elektronenstoßheizung** Die Elektronenstoßheizung dient der Tunnel- und Kontakspitzensäuberung und wird in Kapitel 3.4 genauer erläutert.

3.1.2. Analysekammer

Abbildung 3.3a zeigt die zentrale Einheit des Instruments: die STM-Basis mit Probenhalterung mittig und den vier STM-Einheiten (1-4). Die Probenhalterung mit Probe kann mit Hilfe von flüssigem Helium auf bis zu 50 K gekühlt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde jedoch ausschließlich mit flüssigem Stickstoff auf 130 K gekühlt. Direkt in der Analysekammer finden bis zu 20 weitere Proben Platz, die so unter UHV-Bedingungen aufbewahrt werden können.

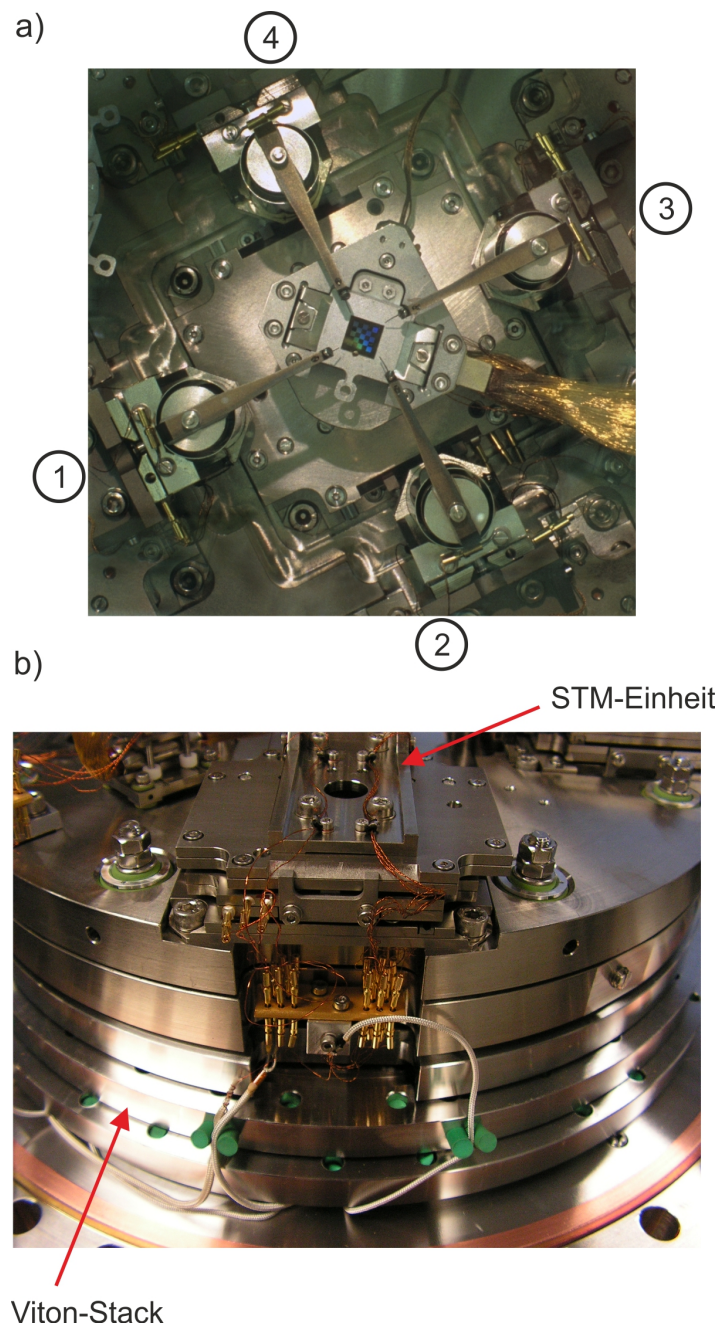


Abbildung 3.3.: a) Aufsicht auf die STM-Basis mit mittig angeordneter Probenhalterung und den vier unabhängig voneinander operierenden STM-Einheiten (1-4), aus [59]. b) Seitenansicht des STM-Aufbaus. Der Viton-Stack, bestehend aus Edelstahlplatten und Viton-Zwischenstücken, und der hintere Teil einer STM-Einheit inklusive Verkabelung sind zu sehen.

Die Anordnung der vier STM-Einheiten ist so gewählt, dass sie gleichzeitig auf einen gemeinsamen Bereich der zentralen Probe zugreifen können. Jede STM-Einheit wird über verschiedene Piezo-Motoren angetrieben (siehe Abbildung 3.4). Die Grobpositionierung in den Koordinaten x_c, y_c, z_c erfolgt über das sogenannte „slip-stick“-Verfahren über mehrere Millimeter hinweg. Die Feinpositionierung der Tunnelspitze erfolgt über den Röhrenpiezo (blau in Abbildung 3.4a). Abbildung 3.4b zeigt ein Modell einer Tunnelspitze. Die Tunnelspitze an sich ist an einem schleubaren Spitzenträger montiert. Dies gewährleistet den schnellen Austausch von Tunnel- und Kontaktspitzen.

Aufgrund erheblicher Stabilitätsprobleme im Tunnelbetrieb musste, neben einigen anderen Änderungen die Dämpfung betreffend, ein zusätzlicher Röhrenpiezo an der Spitzenträgerfront angebracht werden. Die Höhenpositionierung im Tunnelbetrieb erfolgt somit gemeinsam durch den großen Röhrenpiezo unterhalb des Spitzenträgers und den kleinen Röhrenpiezo unmittelbar vorne an der Tunnelspitze. Der kleine Röhrenpiezo verfügt ungefähr über 1/7 des Hubs des großen Röhrenpiezos. Die Stellsignale der Regelung werden mit Hilfe einer Frequenzweiche (Grenzfrequenz 1 Hz) aufgespalten, so dass der große Röhrenpiezo die langsamen Höhenänderungen (wie z.B. Neigung der Probe) und der kleine Röhrenpiezo die schnellen Höhenänderungen (wie z.B. Stufenkanten, atomare Korrugation) übernimmt. Dies beugt einer Anregung des Spitzenträgers im Bereich seiner Eigenfrequenz von 400...500 Hz vor, wie sie bei Regelung nur mit dem großen Röhrenpiezo auftritt, und erhöht die erreichbare Auflösung des STM immens [35, 60].

Rastertunnelmikroskope müssen, um maximales Auflösungsvermögen zu erreichen, möglichst ohne äußere Einflüsse betrieben werden, da die Tunnelspitze im Abstand von wenigen Å über die Oberfläche rastert. Zu diesen externen Einflüssen gehören u.a. Schwingungen, die der Laborboden an das Mikroskop weiterleiten kann. Die Schwingungsdämpfung des STM wird hier im Wesentlichen durch zwei Mechanismen gewährleistet: Für die Dämpfung gegen externe Quellen im niedrigen Frequenzbereich sorgen pneumatische Stützen, auf denen die gesamte Anlage ruht. Da dies für einen STM-Betrieb nicht ausreichte, wurde zusätzlich ein „Viton-Stack“ (siehe Abbildung 3.3b), bestehend aus einer Abfolge von schweren Edelstahlplatten und dämpfenden Viton-Zwischenstücken, verbaut.

Des Weiteren ist die Analysekammer mit einem Rasterelektronenmikroskop der Firma *Staib* ausgerüstet. Dieses ist zentral über der Probe montiert und erlaubt Aufnahmen der Probenoberflächen mit einer Auflösung von bis zu 100 nm. Die Primärenergie der Elektronen kann bis zu 10000 eV gewählt werden. Mit Hilfe des SEM können die verschiedenen Spitzen des *Nanoprobes* auch auf kleinsten Strukturen extrem genau positioniert werden.

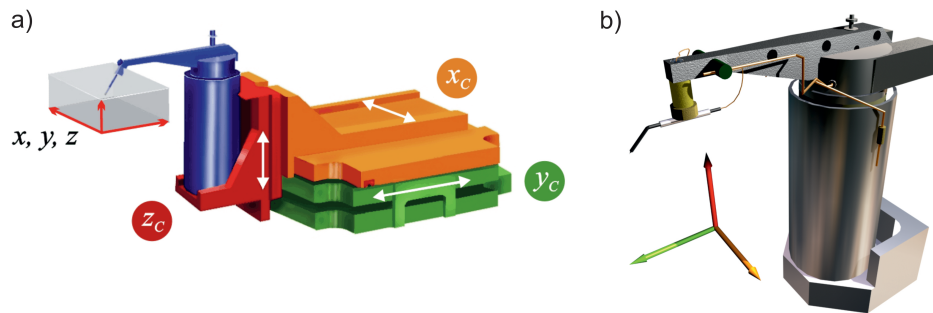


Abbildung 3.4.: a) Schematische Darstellung einer STM-Einheit. Die Grobpositionierung der Tunnelspitze in den Raumrichtungen x_c, y_c, z_c erfolgt über das „slipstick“-Verfahren. Der große Röhrenpiezo (blau) übernimmt die Feinpositionierung der Tunnelspitze in der Höhe und den Scanbetrieb, von [59]. b) Modell einer Tunnelspitze mit Spitzenträger und zusätzlichem Röhrenpiezo. Die beiden Röhrenpiezos übernehmen im Tunnelbetrieb die Höhenregelung der Tunnelspitze, aus [35].

3.2. Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED)

Die Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED, engl. low energy electron diffraction) ist eine Methode der Oberflächenphysik und dient der strukturellen Analyse kristalliner Oberflächen. Es handelt sich um eine beugende Methode, die Aussagen über die vorherrschende Periodizität des untersuchten Kristallgitters zulässt. Im Rahmen dieser Arbeit wird LEED genutzt, um Probenoberflächen vor, während und nach der Präparation strukturell zu charakterisieren und in kürzester Zeit Information über die Qualität der präparierten Probenoberflächen zu gewinnen.

LEED macht sich den grundlegenden Effekt der Beugung von Elektronen an Oberflächen zu nutze. Die Elektronenenergien liegen im Bereich von 20 bis 500 eV, was einer *de Broglie*-Wellenlänge λ von

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \approx 0.05 \dots 0.3 \text{ nm}$$

entspricht. h ist das Plancksche Wirkungsquantum, m die Masse der Elektronen und E deren Energie. Die genutzten Wellenlängen der Elektronen liegen somit in der Größenordnung atomarer Abstände im Festkörpergitter. Die sogenannte universelle Kurve von *Seah* und *Dench* liefert eine Übersicht über die inelastischen mittleren freien Weglängen von Elektronen mit Energien zwischen 0 ... 10000 eV in Festkörpern [65]. Im Bereich der Energien, die bei LEED genutzt werden, liegen die inelastischen mittleren freien Weglängen der Elektronen bei wenigen Å; das LEED verfügt damit über eine hohe Oberflächenempfindlichkeit. Abbildung 3.5 zeigt den schematischen Aufbau eines LEED, wie es auch in dieser Arbeit verwendet wird. Elektronen werden aus der Kathode ausgelöst und Richtung Anode beschleunigt. Dies geschieht mit Hilfe der Spannung $U = 0 \dots 500 \text{ eV}$. Anschließend wird der Elektronenstrahl mittels einer Linse fokussiert und durch eine Anordnung bestehend aus drei feinmaschigen Gittern mit angelegter Hochspannung geleitet. Die Elektronen gelangen frontal auf die senkrecht zum Strahl stehende Probe und werden an den obersten Netzebenen des Atomgitters gebeugt. Die gebeugten Elektronen gelangen anschließend auf den Leuchtschirm. Die Gitter 1 und 3 liegen auf dem gleichen elektrischen Potential wie die Probe (Erddpotential) und sorgen so für einen feldfreien Raum zwischen Probe und Leuchtschirm. So ist eine geradlinige Ausbreitung der gebeugten Elektronen gewährleistet. Am mittleren Gitter (2) wird ein Gegenfeld U_G angelegt, um so Elektronen herauszufiltern, deren Energie kleiner ist als $e \cdot U_G$. Inelastisch gestreute Elektronen werden so effektiv gehindert, den Leuchtschirm zu erreichen. Das Beugungsbild der Probe kann durch ein Fenster

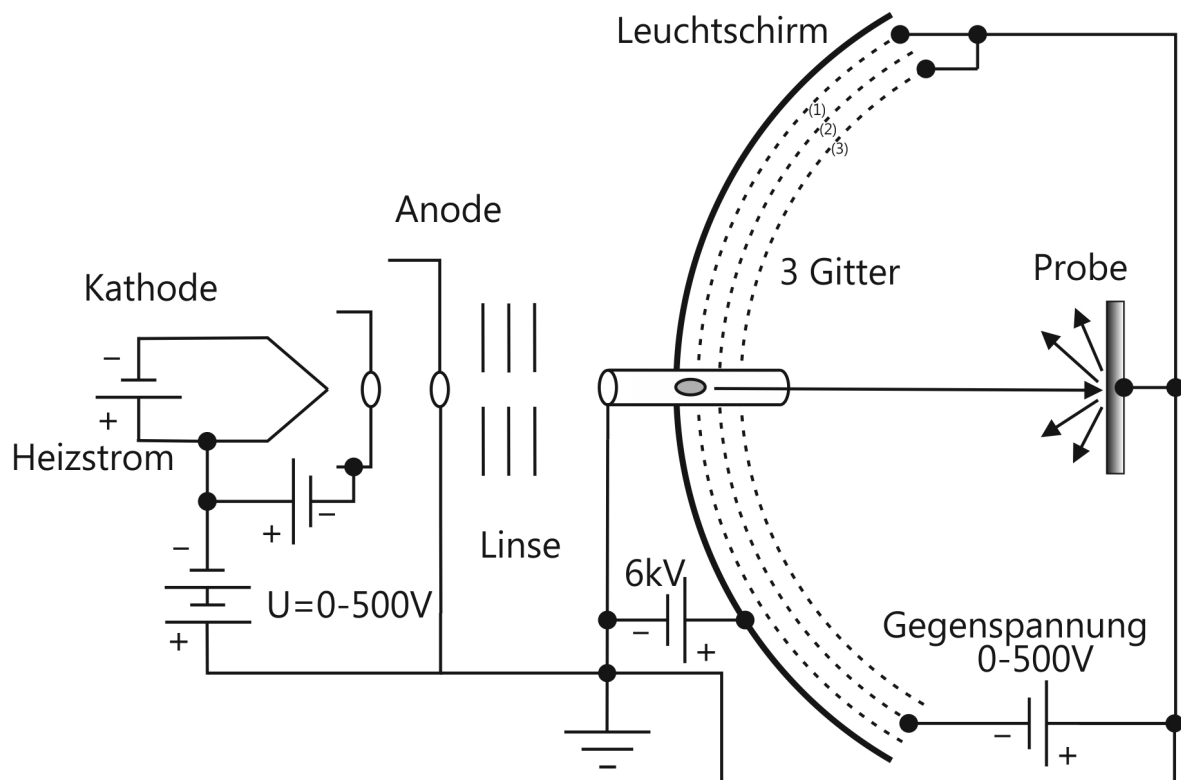


Abbildung 3.5.: Schematischer Aufbau eines LEED-Experiments. Basierend auf [66].

in der UHV-Kammer aufgenommen werden.

Abbildung 3.6 zeigt eine exemplarische LEED-Aufnahmen: zu sehen ist das Beugungsbild der rekonstruierten Si(111)- 7×7 Oberfläche, aufgenommen bei einer Energie von 51 eV und einer Probentemperatur von 270 K . Mittig im Bild ist die Elektronenkanone zu sehen.

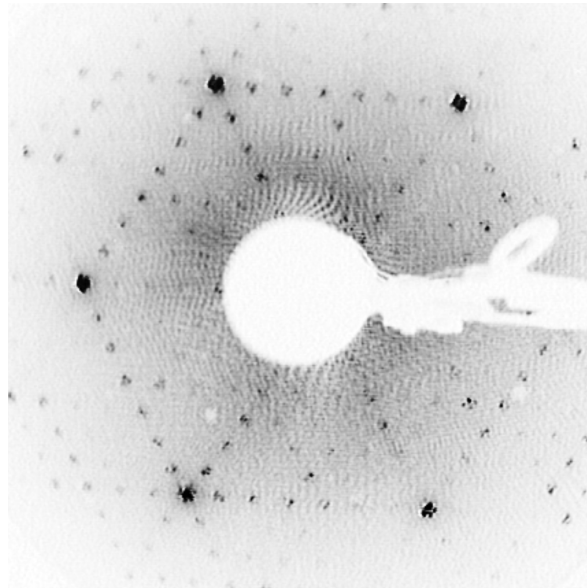


Abbildung 3.6.: LEED-Aufnahme der rekonstruierten Si(111)- 7×7 Oberfläche bei 51 eV, 270 K (Darstellung invertiert).

3.3. Rasterelektronenmikroskopie (SEM)

Das Rasterelektronenmikroskop (SEM, engl. scanning electron microscope) rastert mit einem stark fokussierten Elektronenstrahl leitende Probenoberflächen ab. Die Energie der ausgesandten Primärelektronen des verwendeten SEM können im Bereich von 100 eV bis zu 10000 eV gewählt werden. Das in dieser Arbeit eingesetzte SEM *Nanofocus* der Firma *StaiB* erreicht eine Auflösung von etwas unter 100 nm bei einer Primärelektronenenergie von maximal 10000 eV.

Während des Beschusses der Probenoberfläche mit Primärelektronen werden Sekundärelektronen mit Energien im Bereich einiger eV aus der Oberfläche herausgelöst. Die Bildgebung basiert auf der Intensität der ausgesandten Sekundärelektronen. Diese niederenergetischen Sekundärelektronen werden aus einer Oberflächenschicht von 0.5 bis 2.0 nm herausgelöst, weshalb das SEM Abbildungen von (leitenden) Probenoberflächen ermöglicht.

Die möglichen Wechselwirkungen sollen etwas genauer erläutert werden:

- **Sekundärelektronen** Sekundärelektronen entstehen durch inelastische Wechselwirkungen der Primärelektronen mit den Elektronenhüllen der Probenatome. Sie haben Energien im Bereich bis zu 50 eV; meist zwischen 2 und 5 eV. Aufgrund ihrer geringen Energie und der damit verbundenen geringen Reichweite stammen sie aus einer

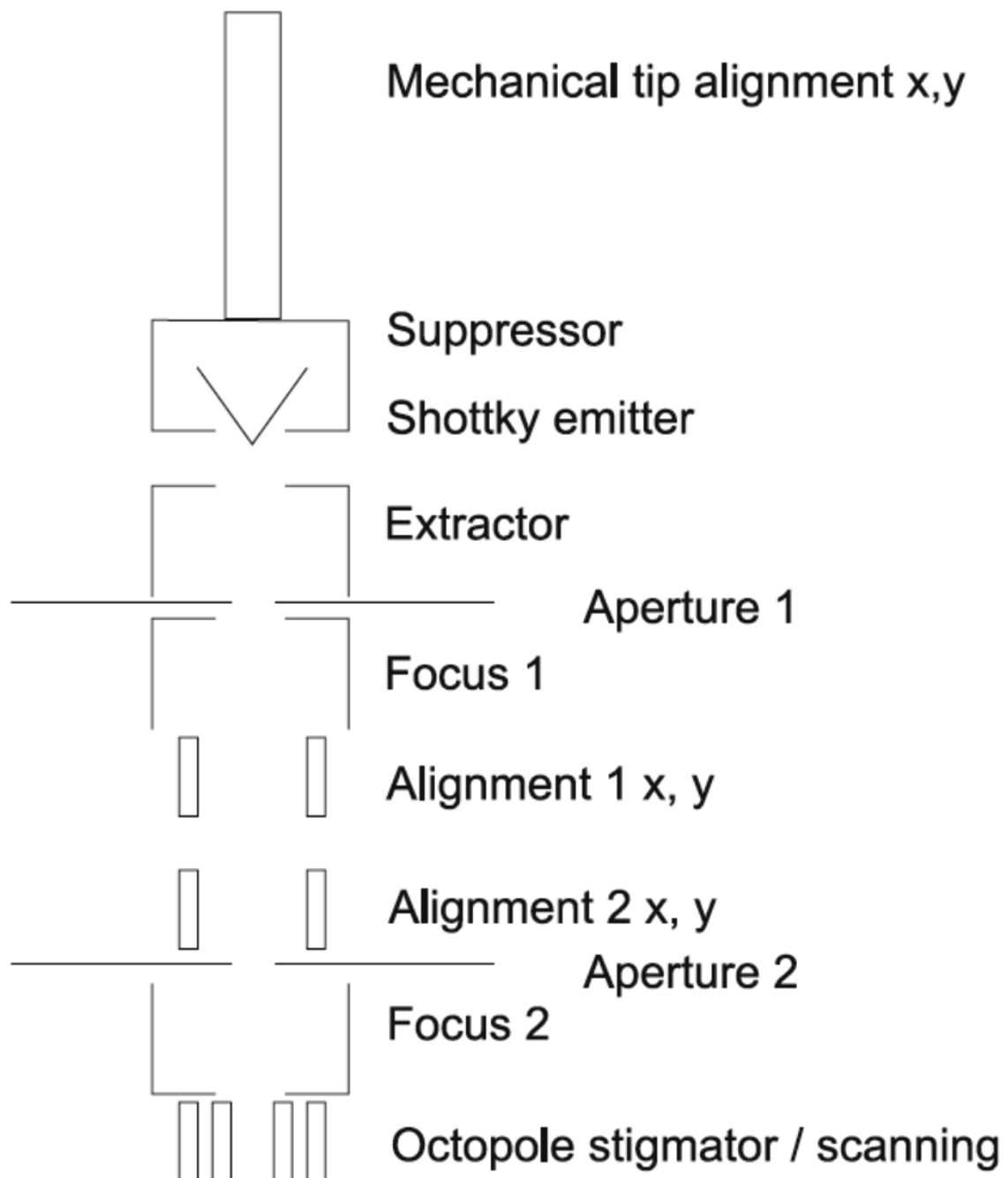


Abbildung 3.7.: (Abbildung aus [67]) Schematischer Aufbau des *Staib Instruments Nanofocus 50* Rasterelektronenmikroskops, das in dieser Arbeit verwendet wurde.

dünnen Schicht an der Probenoberfläche (0.5 bis 2.0 nm).

- **Rückstreuielektronen** Elektronen mit Energien größer als 50 eV (bis zu einigen keV) werden als Rückstreuielektronen bezeichnet und haben eine Eindringtiefe von 1 µm. Rückstreuielektronen sind Primärelektronen, die durch Mehrfachstreuung im Probenmaterial einen Teil ihrer Primärenergie verloren haben.
- **Auger-Elektronen** Beim Auger-Prozess wird ein Elektron eines Oberflächenatoms aus einer tief liegenden Schale gelöst, wodurch dessen Position unbesetzt ist. Ein zweites Elektron aus einer höheren Schale füllt diesen Platz. Die überschüssige Energie wird entweder in Form eines Photons freigesetzt oder auf ein drittes Elektron übertragen. Dieses sogenannte Auger-Elektron verlässt anschließend die Atomhülle und gilt als freies Elektron. Auger-Elektronen besitzen für das Probenmaterial charakteristische Energien. Auch sie stammen aus einer oberen Schicht der Probe.
- **Phononen und Wärmeübertrag** Die Primärelektronen wechselwirken zum einen mit Elektronen und zum anderen mit Phononen der Probenoberfläche. Ein Teil der Primärenergie geht in Phononenanregungen bzw. Wärmeverlusten verloren. Dies führt zu einem kurzzeitigen, minimalen Aufheizen der Probe, das aufgrund der hohen thermischen Leitfähigkeit der Probe vernachlässigt werden kann.

Abbildung 3.7 zeigt den Aufbau des hier verwendeten SEM schematisch. Die Erzeugung der Primärelektronen erfolgt in einem sogenannten Schottky-Emitter. Bei einem Schottky-Emitter emittiert eine geheizte Kathode Elektronen. Zusätzlich wird ein elektrisches Feld zur Erhöhung der Wahrscheinlichkeit, dass Elektronen das Filamentmaterial verlassen können bzw. zur Reduzierung der effektiven Kathodenaustrittsarbeit, angelegt. Dadurch wird die Effizienz dieses Prozesses deutlich verstärkt. Durch ein weiteres elektrisches Feld werden die so erzeugten Primärelektronen mit bis zu 10000 V in Richtung Anode beschleunigt. Der Elektronenstrahl durchläuft ein System elektrostatischer Linsen und Blenden, das der Strahlfokussierung und -ablenkung dient. Der fokussierte Primärelektronenstrahl trifft auf die Probe und erzeugt Sekundärelektronen. Ein Gitter vor dem Detektor kann gegenüber der Probe auf ein elektrisches Potential von -50 bis +50 V gelegt werden. Bei positiver Spannung werden Sekundärelektronen von der Probe in den Detektor beschleunigt, bei negativer Spannung können sie ihn nicht mehr aufgrund des Gegenfelds erreichen. Dann werden nur noch Rückstreuielektronen aufgrund ihrer hohen Energie detektiert. Das durch den Detektor gemessene elektrische Signal wird verstärkt und von einer Software einem

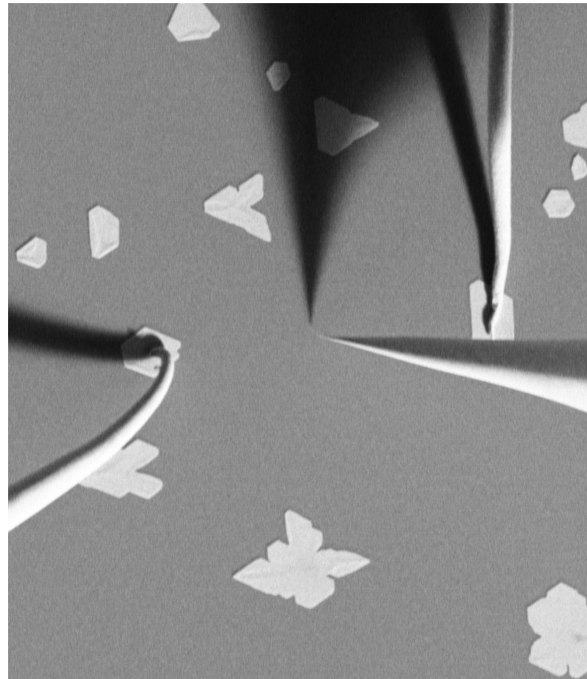


Abbildung 3.8.: Exemplarische SEM-Aufnahme. Gezeigt ist die Oberfläche der Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Ag Rekonstruktion mit mehreren Spitzen des STM. Bildgröße $260 \times 300 \mu m^2$.

Grauwert zugeordnet. Das Abbild der Probenoberfläche wird durch Rasterung des Elektronenstrahls und simultaner Zuordnung der Grauwerte auf einem PC-Monitor erzeugt.

Im vorliegenden Aufbau ist der Detektor seitlich in einem Winkel von 45° zur Normalen der Probe angebracht. Dadurch zeigen die Bilder eine Art seitlichen Schattenwurf. Der Grund hierfür ist, dass Elektronen, die nicht hindernisfrei in Richtung des Detektors emittiert werden, ihn aufgrund der nicht vorhandenen (oder gar negativen) Spannung am Gitter vor dem Detektor nicht erreichen können. Eine bessere Vorstellung der Räumlichkeit erhält man nur durch Kippen von Probe oder Elektronenkanone. Beides ist hier nicht möglich.

Abbildung 3.8 zeigt ein exemplarisches SEM-Bild einer Probenoberfläche mit (111)-orientierten Silberinseln und drei Spitzen des *Nanoprobe*-Systems.

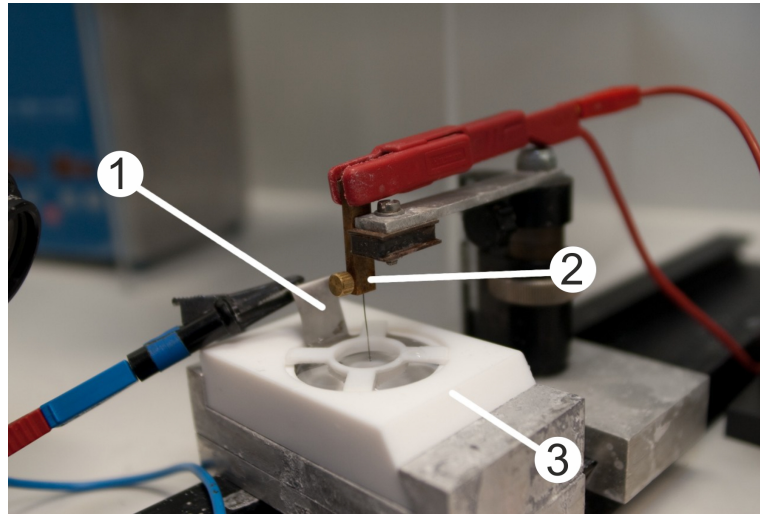


Abbildung 3.9.: Ätzvorrichtung in Großaufnahme. Man sieht die Gegenelektrode (1), den zu ätzenden Draht mit Halterung (2) und das Ätzgefäß (3). Aus [70].

3.4. Tunnel- und Kontaktspitzen

Die metallische Tunnelspitze ist das zentrale Bauteil eines STM. In dieser Arbeit wird prinzipiell zwischen zwei Arten von Spitzen unterschieden: Zum einen werden Tunnelspitzen aus Wolfram (W) für den eigentlichen STM-Betrieb benötigt, zum anderen Kontaktspitzen aus z.B. Wolfram oder Gold (Au). Die Kontaktspitzen werden benötigt, um nanoskalige Strukturen auf der Probenoberfläche zu kontaktieren. Im Rahmen der STP-Messungen werden beispielsweise Kontaktspitzen zum Aufprägen der Querspannung über die Probenoberfläche benötigt. Au-Kontaktspitzen haben gegenüber W-Kontaktspitzen den Vorteil, weicher zu sein und so bei der Kontaktierung die Probe so wenig wie möglich strukturell zu beeinflussen. W-Kontaktspitzen dagegen sind leichter herzustellen und wesentlich stabiler was dafür sorgt, dass sie bei der Kontaktierung nicht so schnell verbiegen und steifere Kontakte ermöglichen. Drüber hinaus können W-Tunnelspitzen mit extrem kleinen Spitzenradien von bis zu 10 nm hergestellt werden [68, 69]. Welches Material genutzt wird hängt also vom jeweiligem Einsatzzweck ab.

3.4.1. Präparation

Präparation der Wolfram-Spitzen

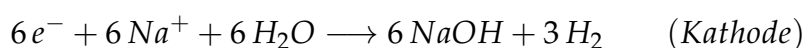
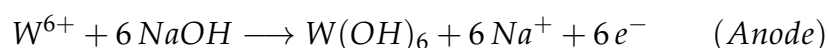
Das vorrangige Ziel bei der Herstellung der W-Tunnelspitzen ist es, eine Spitze zu präparieren, die den Anforderungen der Rastertunnelmikroskopie genügt. Das bedeutet, dass die Tunnelspitze möglichst scharf ist. Es sollte möglichst nur ein bzw. wenige Atome am vorderen Ende der Spitze sitzen, da der Spitzenradius direkt die erreichbare Auflösung des STM beeinflusst (siehe Kapitel 2.1.2). Zudem soll die Anordnung der Atome dort möglichst stabil sein, um gute Tunnelbedingungen erreichen zu können. Tunnelspitzen können, neben der hier vorgestellten, auf viele verschiedene Arten präpariert werden [71, 72].

Im Rahmen dieser Promotion wurde eine Projektarbeit von C. Hünlein und A.K. Klein betreut, deren Ziel es war, die „Präparation und Charakterisierung von Tunnelspitzen“ genauer zu untersuchen [70]. In dieser Arbeit wurde sowohl die Ätzmethode als auch die Charakterisierung via Feldemission für verschiedene Spitzenmaterialien behandelt. Im Folgenden sollen unter anderem Ergebnisse dieser Arbeit vorgestellt werden.

Die Präparation der W-Tunnelspitzen gliedert sich in folgende Schritte:

1. Nasschemisches Ätzen im Elektrolyt
2. Elektronenstoßheizen im UHV
3. Feldemission vor einer Au(111)-Probe im UHV

Fotos des hierzu notwendigen Aufbaus sind in Abbildung 3.9 gezeigt, der schematische Aufbau der Ätzevorrichtung in Abbildung 3.10. Der W-Draht (Dicke $0.375\ \mu\text{m}$, Reinheit 99.95 %) wird in eine dreimolare Natriumhydroxid-Lösung (NaOH, CAS-Nummer 1310-73-2) getaucht. Wie in Abbildung 3.9 gezeigt befindet sich das Elektrolyt in einem aus Teflon gefertigtem Gefäß. Der Spitzendraht bildet für den Ätzvorgang die Kathode, ein PtIr-Draht die Anode. Geätzt wird bei einer Gleichspannung von ungefähr $2 \dots 5\ \text{V}$. Es ist unbedingt darauf zu achten, dass am W-Draht keine Bläschenbildung auftritt, um Schwankungen des Elektrolytpegels zu vermeiden. Die stattfindenden chemischen Reaktionen folgen den Reaktionsgleichungen:



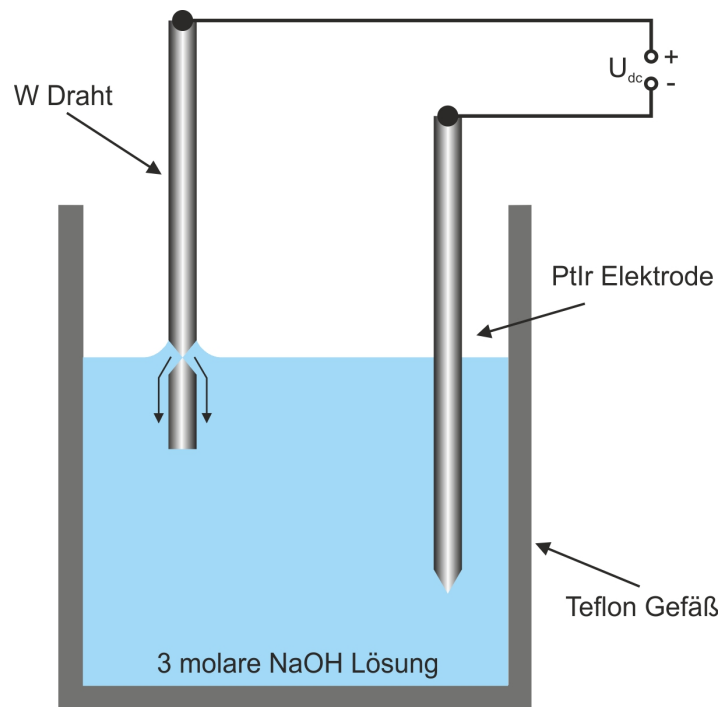


Abbildung 3.10.: Schematischer Aufbau der Ätzevorrichtung.

Der an der Anode entstehende Wolframhybridkomplex $W(OH)_6$ sinkt am Draht ab und schirmt den unteren Drahtteil vor der Lösung ab. Frisches $NaOH$ wird dann von der Lösung nachgeführt. Im Zusammenspiel mit der Oberflächenspannung der Lösung, die dafür sorgt, dass sie am Draht nach oben hin einen Meniskus ausbildet, bildet sich eine verjüngende Struktur des Drahtes aus. Diese Einschnürung schreitet mit fortlaufender Zeit fort bis sich schließlich der untere Teil des Drahtes vom oberen trennt. Exakt in diesem Moment sollte die Gleichspannungsquelle die Spannung abrupt abschalten, um weiteres Ätzen zu verhindern, was zur Abrundung bzw. Abstumpfung der Spitze führen würde. Eine Elektronik überwacht dazu ständig die zeitliche Änderung des Ätzstroms $\frac{dI}{dt}$. Bei einer abrupten Änderung abschaltet diese die Gleichspannung ab. Die Sensitivität, mit der diese Abschaltung arbeitet, kann reguliert werden.

Abbildung 3.11 zeigt hierzu im oberen Teil den einer Messung entnommenen, zeitlichen Verlauf des Ätzstroms zwischen Anode und Kathode. Zu Beginn zeigt sich eine Stromspitze, an der der gesamte Draht geätzt wird. Danach verläuft der Strom mehr oder weniger linear bis zu dem Zeitpunkt, der in der Abbildung mit einem grünen Pfeil gekennzeichnet ist. Zu diesem Zeitpunkt fällt der untere Drahtteil ab und die Elektronik sollte den Ätzevorgang beenden. Dies wäre der ideale Fall, der auch meistens erreicht wird. Es kann allerdings

passieren, wie in der Abbildung im grau hinterlegten Bereich gezeigt, dass die Elektronik nicht sensitiv genug reagiert und die angelegte Spannung nicht zum richtigen Zeitpunkt abschaltet. Dies führt zu einem fortschreitenden Ätzen der Spitze bis sie die Lösung nicht mehr berührt. Dieser Zeitpunkt ist in Abbildung 3.11 mit einem roten Pfeil gekennzeichnet. Im Folgenden ist der Strom schlussendlich null. Die untere Bilderreihe zeigt zeitlich entsprechende Fotos und Skizzen der Spitzenstruktur während des Ätzens. Man sieht sehr gut die Einschnürung, die sich am Draht bildet. Diese wird mit der Zeit immer stärker, bis der untere Drahtteil schlussendlich abfällt. Der verbleibende obere Drahtteil wird schließlich mit entionisiertem Wasser abgespült und unter einem optischen Mikroskop einem ersten Test auf Schärfe der Spitze unterzogen. Ist die Spitze scharf genug wird sie an einen Spitzenträger montiert und kann ins UHV eingeschleust werden.

Hier wird sie zunächst für ungefähr 30 Minuten auf 380 K geheizt, um den Wasserfilm abzdampfen. Anschließend erfolgt der nächste Reinigungsschritt: das Elektronenstoßheizen (siehe Abbildung 3.12). Dazu verfügt die Präparationskammer über eine kleine Wolframwendel. Die Tunnelspitze wird in diese eingeführt und gegenüber der Wendel auf +1200 V positives Potential gelegt. Das elektrische Feld ist proportional zum inversen Krümmungsradius der Spitze: $\vec{E} \propto \frac{1}{r}$. Die Feldstärken sind also an der vordersten Spitze am stärksten. Die aus der Wendel bei Stromfluß thermisch emittierten Elektronen werden so auf die vorderste Front der Spitze beschleunigt und heizen sie bis hin zum Schmelzpunkt. In unserem Fall genügt ein kurzes oranges Aufleuchten der Spitze. Ein Aufschmelzen der Spitze sollte vermieden werden. Beobachtet wird dies durch ein Fernrohr; zum Schutz der Augen wird ein Schwarzglas verwendet. Durch das Elektronenstoßheizen wird die auf der Tunnelspitze nach dem Ätzen sofort wieder vorhandene Oxidschicht entfernt. Dieser Vorgang stärkt außerdem die strukturelle Stabilität der Tunnelspitze und verbessert ihre Leitfähigkeit.

Im Laufe des Tunnelexperiments kann es nötig sein, die Tunnelspitze erneut im UHV zu präparieren, beispielsweise nach einer Kollision von Tunnelspitze und Probenoberfläche. Hierzu wird die Spitze vor einem Au(111)-Kristall in Tunnelkontakt gebracht und eine Hochspannung zwischen diesen angelegt. Diese Hochspannung wird so weit erhöht (bis auf maximal ± 150 V), bis Feldemission einsetzt. Der Abstand zwischen Tunnelspitze und Probe wird dabei konstant gehalten. Durch das immens hohe elektrische Feld und Elektromigrationsprozesse startet eine Neuformierung der Spitzenatome. Die Tunnelspitze kann so verbessert werden, Doppelspitzen können entfernt werden, etc.

In der Praxis existiert kein Unterschied zwischen der Herstellung von W-Tunnelspitzen und der von W-Kontaktspitzen. Lediglich der Spitzenträger, mit dem die Spitze in die Anla-

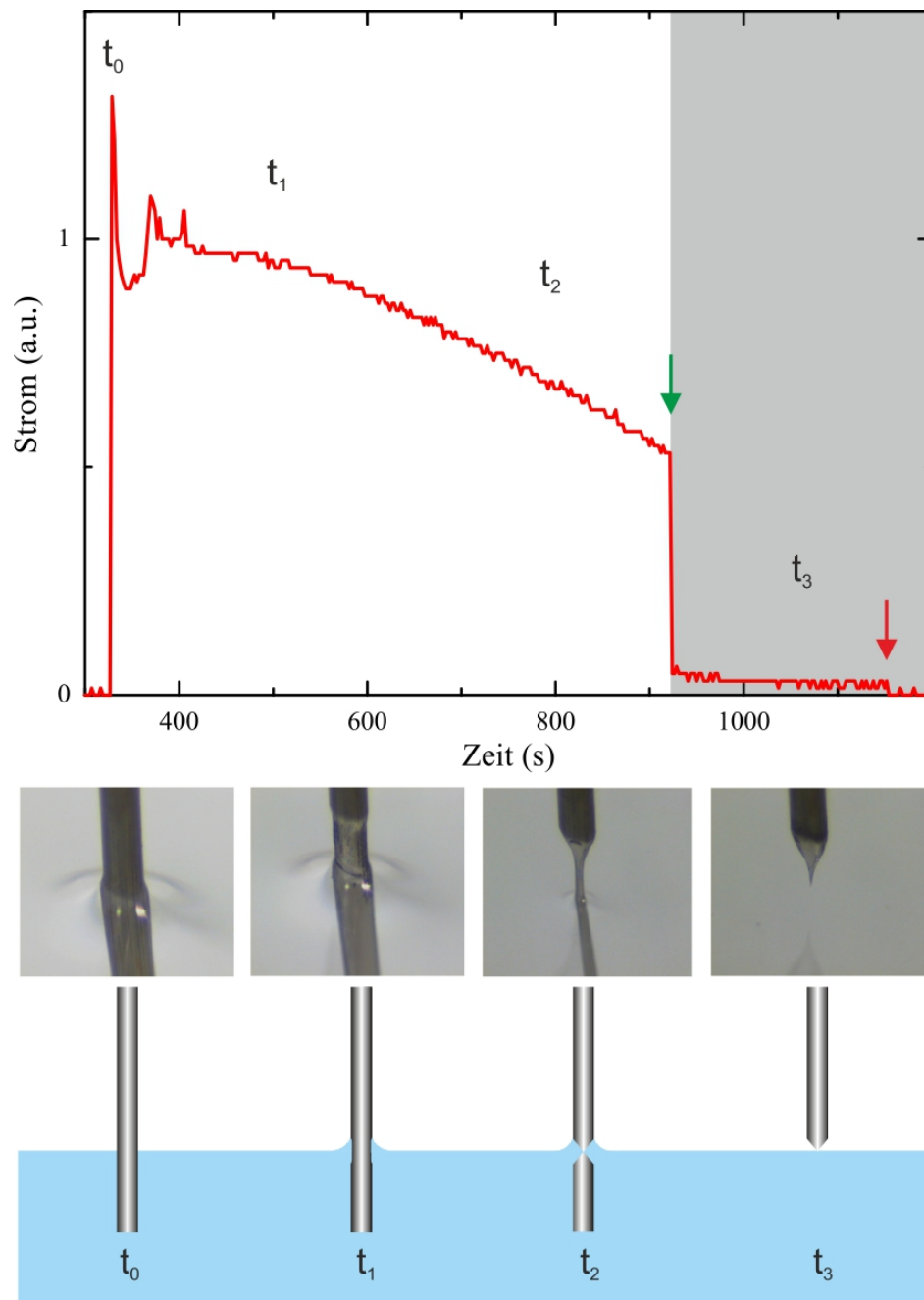


Abbildung 3.11.: Nasschemisches Ätzen einer W-Tunnelspitze in NaOH-Lösung. Gezeigt ist der Stromverlauf zwischen Anode und Kathode. Daneben gestellt ist die Form der Tunnelspitze im zeitlichen Verlauf als Foto und Skizze. Basierend auf [70].

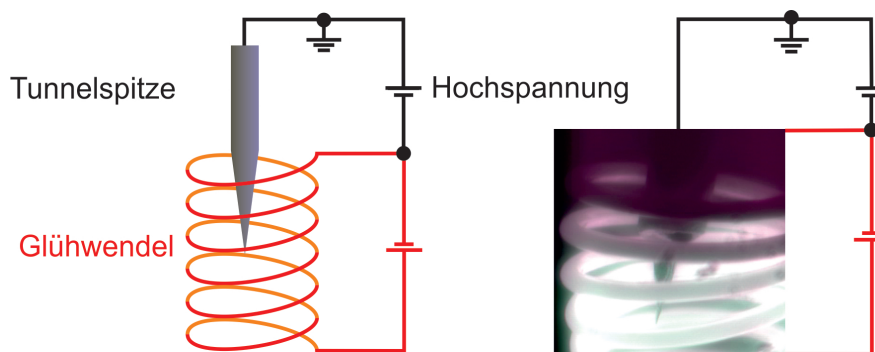


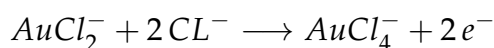
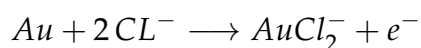
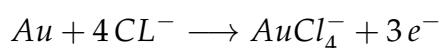
Abbildung 3.12.: Links: Schematischer Aufbau der Elektronenstoßheizung. Die Spitze wird in die Wendel eingeführt und durch thermisch ausgelöste Elektronen geheizt. Rechts: Foto der Elektronenstoßheizung. Aus [60].

ge geschleust wird, unterscheidet sich. Einfache Spitzenträger für Kontaktspitzen verfügen nicht über den vorne zusätzlich angebrachten Piezo (vergleiche Kapitel 3.1), sondern es handelt sich um die originalen Spitzenträger der Firma *Omicron*.

Abbildung 3.13a zeigt (im Bild oben) eine SEM-Aufnahme einer durch die beschriebene Methode hergestellten W-Tunnelspitze vor einer Probe.

Präparation der Gold-Spitzen

Die Gold-Kontaktspitzen werden ähnlich denen aus Wolfram geätzt [73, 74]. Als Lösung kommt hier dreimolares Kaliumchlorid (KCl, CAS-Nummer 7447-40-7) zum Einsatz. Die Gegenelektrode bildet eine handelsübliche Graphitmine. Die ablaufenden Reaktionen am Golddraht folgen den Reaktionsgleichungen [75, 76]:



Auch hier wird der Ätzvorgang gestoppt, sobald die Stromänderung durch Abfallen des unteren Drahtteils eintritt. Die fertig geätzte Spitze wird wieder mit entionisiertem Wasser gereinigt und begutachtet. Bei geglückter Präparation wird die Spitze in einem Spitzen-

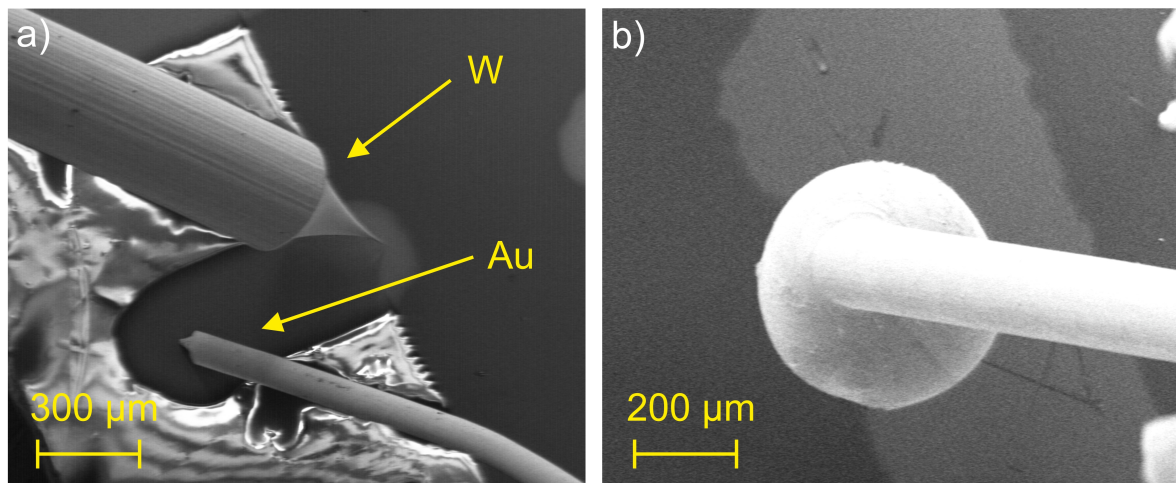


Abbildung 3.13.: a) Typische W- und Au-Spitzen, nasschemisch geätzt. b) Au-Spitze geätzt, dann mittels Elektronenstoßheizung an der Front aufgeschmolzen für probenschonende Au-Kugel.

träger ins UHV gebracht. Anschließend wird sie für ungefähr 30 Minuten auf 380 K geheizt. Eine weitere Säuberung mittels Elektronenstoßheizung wird aufgrund des geringen Schmelzpunktes von Gold gegenüber Wolfram nicht durchgeführt, da die Gefahr sehr groß ist, die Spitze aufzuschmelzen und abzustumpfen (vgl. Abbildung 3.13b).

Abbildung 3.13a zeigt eine SEM-Aufnahme einer durch die beschriebene Methode hergestellten, scharfen Au-Kontaktspitze. Teilabbildung b zeigt dagegen eine Au-Kontaktspitze, die im UHV mittels Elektronenstoßheizung am vordersten Ende aufgeschmolzen wurde. Aufgrund von Oberflächenspannungseffekten bildete sich eine (im Vergleich große) Goldkugel aus. Beide Spitzengeometrien, scharf und stumpf/kugelförmig, können für spezielle Au-Kontaktierungen verwendet werden: Die scharfen, spitzen Au-Kontaktspitzen eignen sich besonders für die Kontaktierung von kleinen Strukturen wie beispielsweise Nanodrähten oder Inseln auf der Probenoberfläche. Die stumpfen Au-Kontaktspitzen können größere Strukturen bzw. die Probenoberfläche großflächig und besonders schonend kontaktieren.

3.4.2. Charakterisierung der Tunnelspitzen

Es kann hilfreich sein, die frisch präparierte W-Tunnelspitze noch in der Präparationskammer einer ersten qualitativen Überprüfung zu unterziehen. Mittels Feldemission vor einer metallischen Elektrode kann auf diese Weise schnell der Spitzenradius abgeschätzt und die

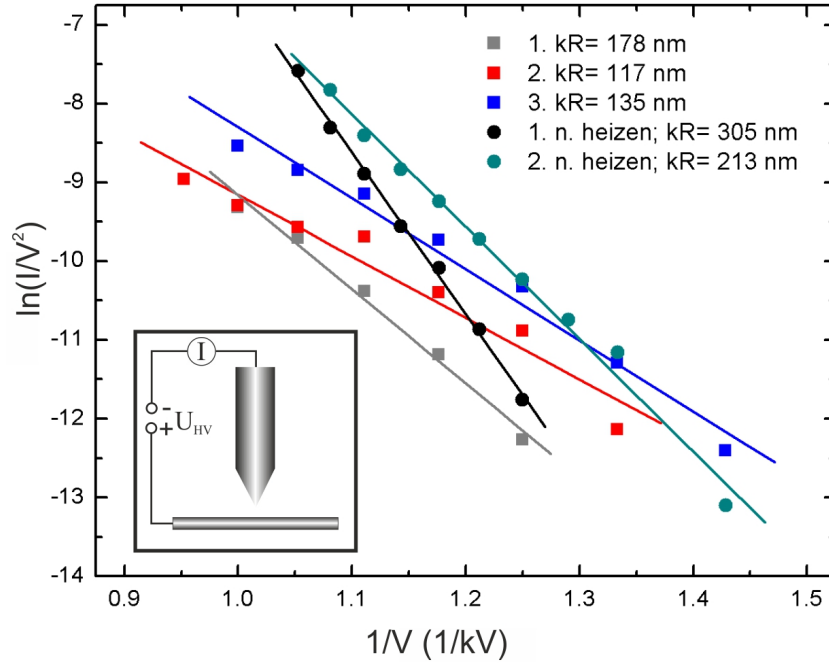


Abbildung 3.14.: Typische Fowler-Nordheim-Auftragung der Feldemission einer W-Tunnelspitze. Aus der Steigung der Geraden kann der Spitzenradius bestimmt werden. Der schematische Aufbau zur Feldemission ist als Inset gezeigt. Basierend auf [70].

Stabilität geprüft werden [77, 78].

Hierzu wird die Spitze wie im Inset von Abbildung 3.14 illustriert in ca. 1...2 cm Abstand vor einer Metallelektrode positioniert. Zwischen Tunnelspitze und Elektrode wird eine Hochspannung von bis zu 2.5 kV so angelegt, dass ein Tunnelstrom von der Tunnelspitze zur Elektrode fließt. Das Tunneln unter solch großen elektrischen Feldern nennt man *Fowler-Nordheim-Tunneln* [79]. Durch das große elektrische Feld, das an der Tunnelspitze anliegt, wird die Wahrscheinlichkeit erhöht, dass Elektronen das Material verlassen und in die Gegenelektrode gelangen. *Fowler* und *Nordheim* folgend kann die Stromdichte der Feldemission j_{Emi} angegeben werden als [79]:

$$j_{Emi} = 6.2 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{E_F/\Phi}}{E_F + \Phi} E^2 \exp \left(-6.8 \cdot 10^7 \frac{\Phi^{3/2}}{E} \right) \frac{A}{cm^2} \quad (3.1)$$

Hier ist E_F die Fermienergie in eV , Φ die Austrittsarbeit des Spitzenmaterials in eV , E das elektrische Feld in $\frac{V}{cm}$.

Gleichung 3.1 muss aufgrund der Berücksichtigung von Bildladungseffekten korrigiert werden. Der Korrekturfaktor α ist eine Funktion des angelegten Feldes und der Austrittsarbeit des Spitzenmaterials. Er variiert langsam in E und kann daher als Konstante mit einem Wert zwischen 0 und 1 angenommen werden [77]. Mit dieser Korrektur folgt aus 3.1

$$j_{Emi} = 6.2 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{E_F/\Phi}}{\alpha^2(E_F + \Phi)} E^2 \exp \left(-6.8 \cdot 10^7 \frac{\Phi^{3/2} \alpha}{E} \right) \quad (3.2)$$

Das elektrische Feld der Spitze kann mit $E = V(kR)^{-1}$ angegeben werden. V ist hier die angelegte elektrische Spannung, R der Spitzenradius und k ein geometrischer Korrekturfaktor, der die reelle Form der Tunnelspitze berücksichtigt. Multipliziert man Gleichung 3.2 mit der gesamten emittierenden Fläche A und setzt den genannten Term für das elektrische Feld E ein, folgt schließlich für den Emissionsstrom I_{Emi} zwischen Tunnelspitze und Elektrode:

$$I_{Emi} = A 6.2 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{E_F/\Phi}}{\alpha^2(E_F + \Phi)} \frac{V^2}{(kR)^2} \exp \left(-6.8 \cdot 10^7 \frac{\Phi^{3/2} \alpha k R}{V} \right) \quad (3.3)$$

Auf diese Weise erhält man eine Möglichkeit, direkt die Schärfe der Tunnelspitze zu qualifizieren. Je kleiner der Spitzenradius ist, desto größer ist der Emissionsstrom aufgrund der Proportionalität $I_{Emi} \propto \frac{1}{R}$.

Will man die I - V -Charakteristik in *Fowler-Nordheim-Auftragung* darstellen, muss Gleichung 3.3 nur noch durch V^2 geteilt und der natürliche Logarithmus gebildet werden:

$$\ln \left(\frac{I_{Emi}}{V^2} \right) = \underbrace{\ln \left(A 6.2 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{E_F/\Phi}}{\alpha^2(E_F + \Phi)(kR)^2} \right)}_{\text{Schnittpunkt mit der } x\text{-Achse}} \underbrace{-6.8 \cdot 10^7 \frac{\Phi^{3/2} \alpha k R}{V}}_{\text{Steigung}} \quad (3.4)$$

Die Einheiten sind I_{Emi} in A , V in V , E_F und Φ in eV und R in cm . Trägt man $\ln \left(\frac{I_{Emi}}{V^2} \right)$ gegen $\frac{1}{V}$ auf, erhält man den *Fowler-Nordheim-Plot*, d.h. eine Gerade mit der Steigung $-6.8 \cdot 10^7 \Phi^{3/2} \alpha k R$. Mit den bekannten Konstanten α, k, Φ kann der Spitzenradius direkt aus der Steigung der Geraden ermittelt werden.

Die Austrittsarbeit von Wolfram wird mit $4.5 eV$ angenommen, es werden $\alpha = 1$ und k je nach Spitzengeometrie gemäß [77] zwischen $3 \dots 35$ gesetzt. Es macht daher Sinn, den

Spitzenradius in der Form $k \cdot R$ anzugeben.

Abbildung 3.14 zeigt typische Fowler-Nordheim-Auftragungen einer W-Tunnelspitze. Aufgetragen sind die I - V -Charakteristiken einer W-Tunnelspitze vor dem Elektronenstoßheizen (Rechtecke) und jeweils nachdem die Spitze zwischendurch einmal bzw. zweimal elektronenstoßgeheizt wurde (Kreise). Man erkennt an der geringeren Steigung der Geraden, dass die reine Feldemission bereits die Tunnelspitze schärft (grau, rot, dann blau). Das erste Heizen vergrößert den Spitzenradius immens (schwarz), macht die Spitze also stumpfer, wohingegen der zweite Heizzyklus sie wieder leicht schärft (grün), der ursprüngliche Radius aber nicht mehr erreicht wird.

Ein weiterer Anhaltspunkt zur Beurteilung der Schärfe einer Tunnelspitze ist die Spannung, bei der überhaupt ein Emissionsstrom einsetzt. Je kleiner die dafür notwendige Spannung ist, desto schärfer ist in der Regel die Tunnelspitze. Diese Einsatzspannung sollte im Bestfall 600...700 V betragen.

Die letzte Beurteilung der Qualität einer präparierten Tunnelspitze ist dennoch das STM-Experiment selbst.

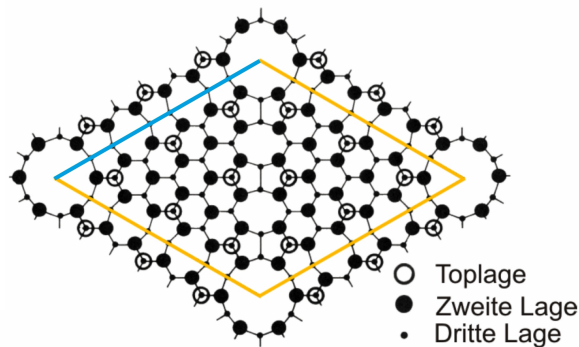


Abbildung 3.15.: Einheitszelle der Oberflächenrekonstruktion von Si(111)- 7×7 , aus [80].

3.5. Kalibrierung des Rastertunnelmikroskops

Um definitive Aussagen über mit dem STM gemessene Höhen und laterale Größen angeben zu können, müssen die Scan-Piezokristalle kalibriert werden. Eine beliebte Methode, dies zu bewerkstelligen, ist die Abbildung der verhältnismäßig leicht aufzulösenden (7×7)-Rekonstruktion der Si(111)-Oberfläche. Diese ist gut bekannt und kann daher als Referenz dienen. In Abbildung 3.15 ist die Einheitszelle der Si(111)-(7×7) Oberfläche schematisch dargestellt. Der Abstand zweier sogenannter *Cornerholes*, in Abbildung 3.15 blau markiert, beträgt $\approx 27 \text{ \AA}$ [81, 80]. Mit diesem Wissen lassen sich die Scanpiezokristalle im Vergleich mit Messdaten für die Richtungen x und y kalibrieren, wenn ein atomar aufgelöstes STM-Bild dieser Oberflächenrekonstruktion vorliegt.

Die z -Richtung wird anhand bestens bekannter, atomarer Stufenkantenhöhen von z.B. Si(111) (3.1 \AA aus [81, 80]) oder Au(111) (2.35 \AA aus [82]) kalibriert. Dies geschieht ebenfalls im Vergleich mit einem atomar aufgelösten STM-Bild.

3.6. Messdatenerfassung und -auswertung

Für den Betrieb des STM und eine spätere Auswertung der Messdaten ist eine geeignete Aufzeichnung der Signale nötig. Die Kommunikation der Steuerelektronik mit dem STM erfolgt über analoge Signale, die Datenerfassung und Regelung erfolgt digital. Die jeweilige Umwandlung dieser Signale übernimmt die Messkarte *SignalRanger MK2-A810* der Firma *softdb* [83]. Zur Kommunikation des Messrechners mit der Messkarte wird die freizugängliche, unter GPU Lizenz (General Public License) stehende, Linux-Software *GxSM* [84] verwendet. Alle Signale des STM werden jeweils für beide (schnelle) Scanrichtungen getrennt aufgezeichnet, um Regelungsartefakte etc. sofort erkennen zu können. Signale, die aufgezeichnet werden können, sind beispielsweise Topografie, Tunnelstrom, lokales elektrochemisches Potential, etc. Darüber hinaus bietet das Programm die für diese Arbeit wichtige Möglichkeit Strom-Spannungs-Kennlinien zu fahren und aufzuzeichnen. Das Einsatzgebiet dieser Software erstreckt sich nicht nur auf die Steuerung eines STM, unterstützt werden zahlreiche weitere Instrumente wie beispielsweise Rasterkraftmikroskope.

Die Nachbearbeitung der Messdaten erfolgt unter Microsoft Windows [85] mit der frei erhältlichen Software *WSxM* der Firma *Nanotec* [86, 87].

Des Weiteren wurde zur Auswertung diverser Daten, wie beispielsweise der I-V-Messdaten, die Software *Origin Pro* von *OriginLab* [88] genutzt.

4. Präparation und strukturelle Analyse der Proben

4.1. Si(111)-(7 × 7)

Um die (7 × 7)-Rekonstruktion des Si(111) zu präparieren wurden diverse Silizium-Wafer verwendet [89]. Die Eigenschaften der kommerziell erhältlichen Wafer sind: 0.5° Fehlneigung, spezifischer Widerstand von ca. $130 \Omega \cdot \text{cm}$, *n*-Dotierung. Die (7 × 7) rekonstruierte Si(111)-Oberfläche dient häufig als Substrat für heterogene Proben.

Die Präparation folgt folgendem Schema: Zunächst wird aus dem Wafer ein passendes Stück Silizium herausgeschnitten und in den Halbleiter-Probenträger eingepasst. Die Probe muss fest im Probenträger sitzen, damit Vibrationen etc. vermieden werden. Anschließend wird der Kristall mit Stickstoff abgeblasen und so von Spaltrückständen und aufliegendem Staub befreit. Träger und Probe können nach einer Pumpzeit von mindestens 30 Minuten über die Schleuse in die Präparationskammer transferiert werden.

Die Probe wird zunächst mittels Widerstandsheizung auf 370 K geheizt, um leichte Verschmutzungen und Wasser zu entfernen. Darüber hinaus wird die Leitfähigkeit des Substrats soweit erhöht, dass es mit Hilfe der Direktstromheizung zu höheren Temperaturen geheizt werden kann. Idealerweise wird die Probe im Temperturbereich zwischen 770...870 K für ungefähr 12 Stunden gehalten und gast so aus.

Der eigentliche Präparationsvorgang startet jetzt: Der Kristall wird mehrfach hintereinander mittels Direktstromheizung auf bis zu 1500 K erhitzt („flash annealing“), also bis nah an den Schmelzpunkt (1683 K). Der Kristall leuchtet dabei hell gelb und wird optisch und per Pyrometer kontrolliert. Ein gleichmäßiges, hellgelbes Aufleuchten deutet auf eine einheitliche Erhitzung der Probe hin. Nach dem „flash annealing“ wird die Temperatur mit einer Rate von ungefähr 0.5 K/s reduziert. Diente das extreme Heizen des Kristalls noch der Säuberung, bildet sich in diesem Abkühlvorgang die (7 × 7)-Oberflächenrekonstruktion aus. Laut *Osakabe et al.* [90] vollzieht die Si(111)-Oberfläche bei ca. 1100 K einen Phasenüber-

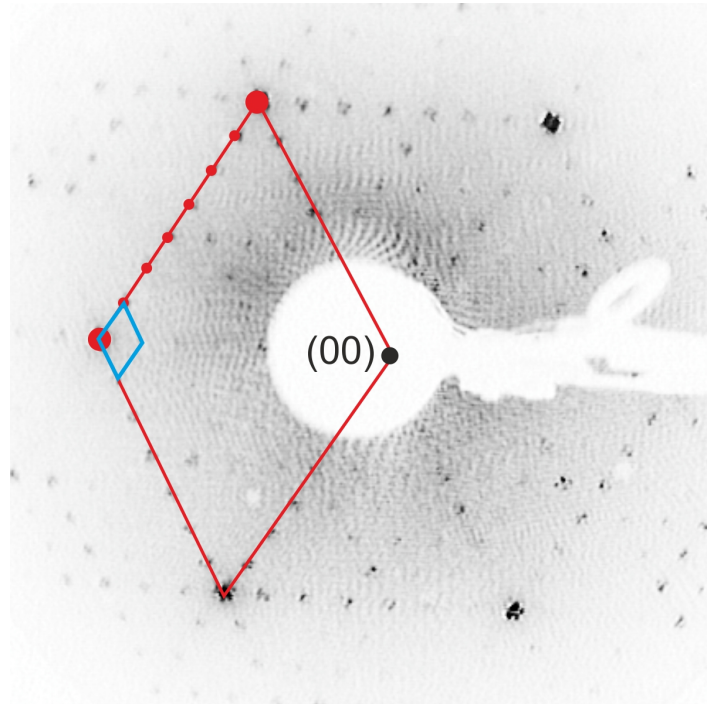


Abbildung 4.1.: LEED-Aufnahme der Si(111)-(7×7) Oberfläche bei 51 eV , 270 K . Zwischen zwei Hauptspots liegen je sechs weitere Intensitätsmaxima. Eingezeichnet ist die (1×1)-Einheitszelle in rot und die (7×7)-Einheitszelle in blau.

gang von der (1×1)- in die (7×7)-Struktur. Die Phasenübergangstemperatur sollte für die Ausbildung einer homogen ausgeprägten Rekonstruktion möglichst langsam überschritten werden. Eine erste Einschätzung der Güte der Präparation kann nach Abkühlung der Probe mittels Sichtprüfung schnell bestimmt werden. Ist die Oberfläche des Kristalls rau und erscheint somit matt, muss die Präparation wiederholt werden. Ist die Probenoberfläche glatt und perfekt reflektierend, deutet alles auf eine gelungene Präparation hin.

Mittels LEED wird nach der Präparation die Oberfläche untersucht, was eine erste strukturelle Charakterisierung der Probenoberfläche darstellt. Eine typische LEED-Aufnahme der Si(111)-(7×7) Oberflächenrekonstruktion ist in [Abbildung 4.1](#) zu sehen.

Nach erfolgreicher Präparation wird die Probe in die Analysekommer transferiert oder weitergehenden Präparationsschritten unterzogen.

4.2. Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag

Zunächst muss die Si(111)-(7×7)-Oberflächenrekonstruktion präpariert werden, da die Präparation der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) $R30^\circ$ -Ag Oberflächenrekonstruktion darauf aufbaut. Anschließend wird Silber aus einem Metallverdampfer auf die Oberfläche aufgebracht. Die Probe wird dabei mittels Direktstrom auf ca. 830 K geheizt und den aus dem Verdampfer kommenden Silberatomen ausgesetzt [91]. Durch das Angebot von nominell mehreren nm Silber bildet sich nicht nur die Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) $R30^\circ$ -Ag aus, sondern das überschüssige Silber kristallisiert zudem in Silberinseln. Diese Inseln bieten die Möglichkeit, mit Hilfe der Spitzen des Nanoprobe-Systems die Oberfläche nahezu zerstörungsfrei zu kontaktieren.

Am Nanoprobe-System besteht die Möglichkeit, Aufdampfmaterialien durch eine Schattenmaske hindurch auf die Probe zu dampfen. Hierdurch resultieren auf der Probenoberfläche ca. 0.4 mm^2 große Bereiche, die dem Aufdampfmaterial ausgesetzt wurden. Im konkreten Fall verbleibt zwischen diesen Bereichen die zuvor präparierte (7×7)-Oberflächenrekonstruktion.

Nach der Aufdampfprozedur wird die Probe abgekühlt und der Kristall mittels LEED untersucht. Abbildung 4.2a zeigt eine LEED-Aufnahme der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) $R30^\circ$ -Ag Rekonstruktion. Das Aufdampfen durch die Schattenmaske und die endliche Ausdehnung des LEED-Elektronenstrahls sorgen dafür, dass in Abbildung 4.2a sowohl die reine (7×7)- als auch die ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Rekonstruktion zu sehen sind. Die Anordnung der Reflexe ist hexagonal. Die reziproken Gittervektoren der ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion sind um 30° gegenüber denen der reinen (1×1) gedreht. Die Länge des reziproken Gittervektors der $\sqrt{3}$ -Rekonstruktion ist $\frac{8\text{Si}}{\sqrt{3}}$, d.h. die Einheitszelle der ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Rekonstruktion ist im Realraum um den Faktor $\sqrt{3}$ größer als die der reinen (1×1).

Abbildungen 4.2b und c zeigen die ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) $R30^\circ$ -Ag Oberfläche aufgenommen mit STM und SEM. Die Inseln, die das überschüssige Silber auf der Oberfläche gebildet hat, sind im SEM-Bild gut zu erkennen. Hier kontaktieren bereits zwei Spitzen des Nanoprobe-Systems darüber die Oberfläche. In der STM-Aufnahme sieht man die Stufung des Substrats, die Terrassenbreite beträgt ungefähr 30 nm.

Die Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) $R30^\circ$ -Ag Rekonstruktion weist einen zweidimensionalen, metallischen Oberflächenzustand mit parabolischer Dispersionsrelation auf, der nahezu vollständig vom Substrat entkoppelt ist. Vorherige Rastertunnelpotentiometrie-Untersuchungen bestätigen dies [4, 92].

Ihre genaue atomare Struktur bei verschiedenen Temperaturen wird in der Forschung immer

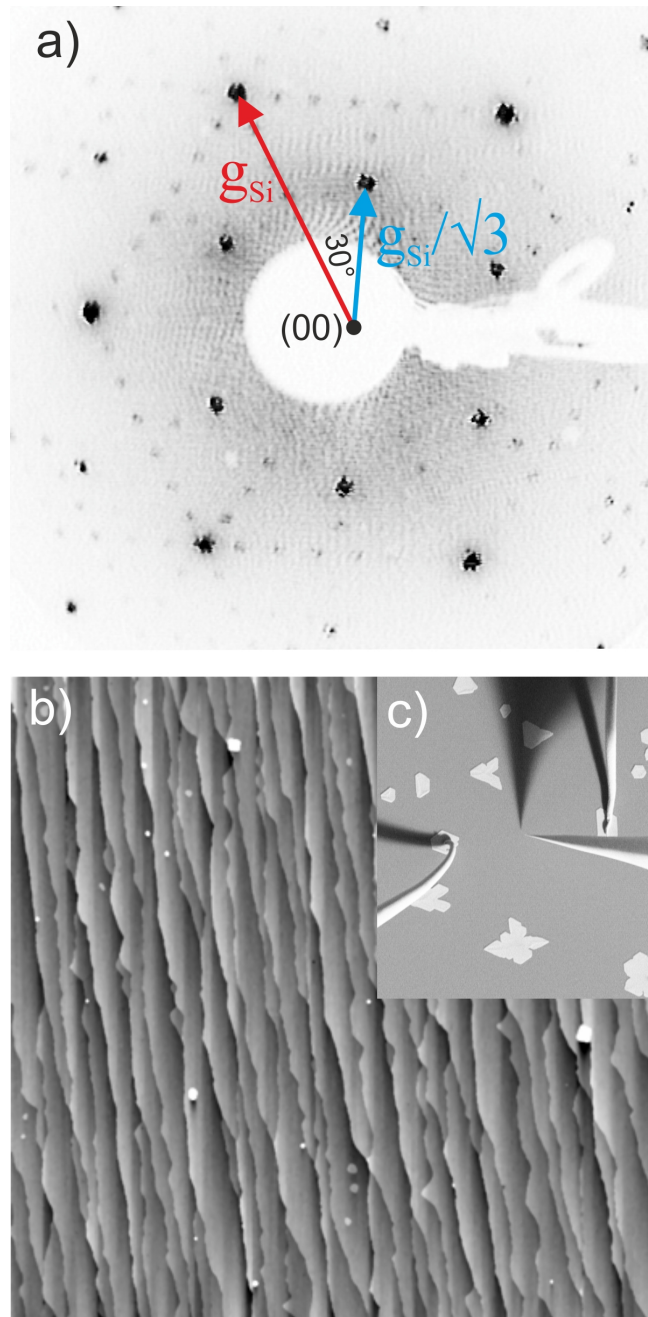


Abbildung 4.2.: Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) R30°-Ag Oberflächenrekonstruktion, abgebildet mit a) LEED bei 51 eV, 270 K. Die reziproken Gittervektoren der (1×1) - (rot) und der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Rekonstruktion (blau) sind um 30° gedreht. Zusätzlich sind die (7×7) -Reflexe zu sehen. b) STM, Bildgröße $1.2 \times 1.2 \mu m^2$. c) SEM, Bildgröße $250 \times 290 \mu m^2$.

noch diskutiert. Vorgeschlagen wurden zwei Strukturmodelle: Das IET-Modell (engl., inequivalent trimer) für tiefe Temperaturen und das HCT-Modell (engl., honeycomb-chained-trimer) für Raumtemperatur. In beiden Modellen beinhaltet die Einheitszelle nur ein Silberatom pro unrekonstruierter Si(111)-Einheitszelle. Für weitergehende Informationen sei auf Kapitel [5.1](#) verwiesen.

4.3. Ge(001)c(8×2)-Au

Das Germanium-Substrat und die Präparationsparameter wurden uns von *M. Wojtaszek* aus der Arbeitsgruppe von *Prof. Dr. Szymonski* von der *Jagiellonian University of Krakow, Poland* zur Verfügung gestellt.

Es handelt sich um n-Typ Germanium in (001)-Orientierung, undotiert, mit einem spezifischen Widerstand von $30 \Omega \cdot \text{cm}$. Nach Einbau in den Halbleiterprobenträger und dem Einschleusen der mittels Isopropanol und Stickstoff gereinigten Proben in die Präparationskammer werden die Ge-Kristalle zunächst bei 930 K mit Hilfe der Direktstromheizung ausgegast. Danach wird die Probe ionenstrahlgeätzt bei einer Probentemperatur von ebenfalls 930 K. Bei der Präparation dieser Proben wurde nach jedem Schritt eine Untersuchung der Struktur mittels LEED gemacht.

Das Gold wird bei einer Probentemperatur von 130 K aufgedampft. Es wurde bei einer Rate von ca. 0.28 nm/min sechs Minuten lang bedampft (entspricht ca. 1.7 nm). Nach dem Bedampfungsvorgang wird die Probe zehn Minuten lang mittels Direktstrom auf 810 K geheizt, um Ausheilungsprozesse zu aktivieren (annealen).

Abbildung 4.3a zeigt eine LEED-Aufnahme der reinen Ge(001)-Probe. Die quadratische Struktur der (001)-Oberfläche ist zu erkennen. Abbildung 4.3b zeigt eine LEED-Aufnahme der mit Gold bedampften und thermisch ausgeheilten Probenoberfläche, der so genannten Ge(001)c(8×2)-Au Oberflächenrekonstruktion. Interessant ist diese Oberfläche vor allem deshalb, da atomare Drähte, d.h. nur ein Atom breite, eindimensionale Strukturen, auf der Oberfläche ausgebildet werden [93, 94]. Eine Abbildung dieser Drähte mit dem STM ist in Abbildung 4.3c gezeigt. Gemäß *J. Schäfer et al.* ist der Abstand der Drähte 16 \AA , was dem Vierfachen des Abstands der Germaniumatome der unrekonstruierten Ge(001)-Oberfläche entspricht. Die Länge ist prinzipiell nicht beschränkt und kann bis in den μm -Bereich gehen [5]; eine natürliche Begrenzung bildet die nächste Stufenkante bzw. Domänengrenze. *Blumenstein et al.* konnten mittels winkelaufgelöster Photoemission zeigen, dass die Drähte keine elektronische Kopplung untereinander haben und somit eine eindimensionale Leitfähigkeit aufweisen [6, 95]. Die Orientierung der Drähte folgt der der (2×1)-rekonstruierten Germaniumoberfläche. Dort sind zwei um 90° gedrehte Domänen vorhanden, somit liegen die Drähte auch in diesen zwei Domänen vor und grenzen im 90° Winkel an die jeweils nächste Domäne (vergleiche Abbildung 4.3c).

Das überschüssige Gold, das nicht für die Ausbildung der Oberflächenrekonstruktion benötigt wird, kondensiert in kristallinen Goldinseln. Unsere topografischen Messungen er-

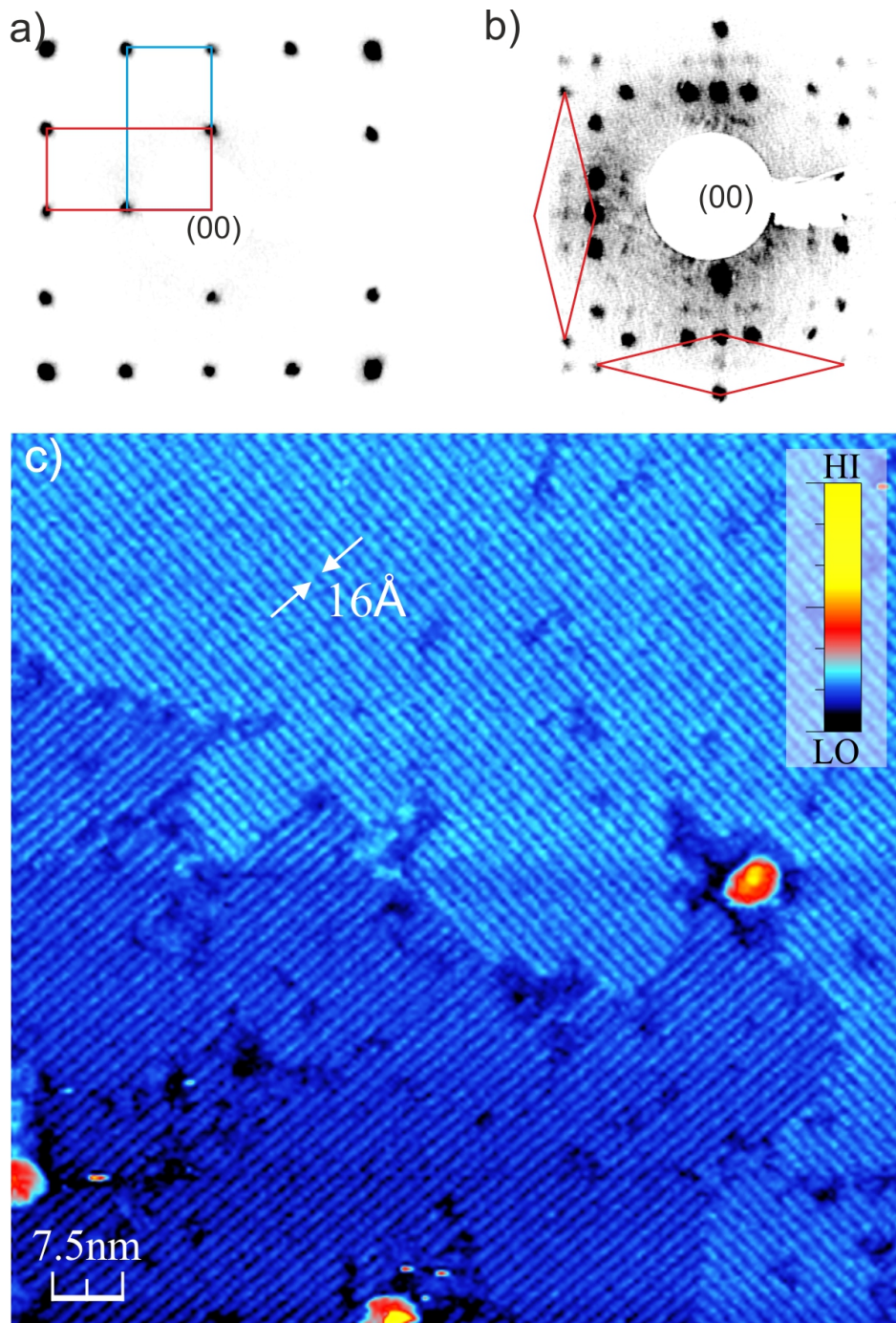


Abbildung 4.3.: a) LEED-Aufnahme der reinen Ge(001) Oberfläche bei 43 eV . In rot und blau eingezeichnet sind die reziproken Einheitszellen der beiden um 90° gegeneinander gedrehten Domänen der Ge(001)-Oberfläche. b) LEED-Aufnahme der Ge(001)c(8×2)-Au Oberflächenrekonstruktion bei 25 eV . Auch hier sind in rot die beiden um 90° zueinander gedrehten reziproken Einheitszellen eingezeichnet. c) STM-Aufnahme von Ge(001)c(8×2)-Au, aufgelöst sind die ein Atom breiten, drahtähnlichen Strukturen auf der Oberfläche, $U_t = -1\text{ V}$, $I_t = 30\text{ pA}$, 130 K .

gaben eine durchschnittliche Größe von ca. 100 nm.

Auch über die Struktur der Ge(001)c(8 × 2)-Au Oberflächenrekonstruktion wird in der Wissenschaft angeregt diskutiert. Es ist bisher unklar, wie die Germanium- und Goldatome die Drähte ausbilden und welche Atome wo in den Drähten zu finden sind. *B. Poelsema et al.* [96] und *J. Schäfer et al.* [97] haben hierzu zwei Modelle und experimentelle Ergebnisse vorgestellt, eine endgültige Aufklärung steht allerdings noch aus. Eine besondere Eigenschaft der atomaren Reihen an der Oberfläche ist die quasi-eindimensionale Leitfähigkeit [5, 95]. Ein Nachteil dieses Probensystems zu allen anderen in dieser Arbeit verwendeten ist praktischer Natur und sollte hier ebenfalls erwähnt werden: Ist die Probenoberfläche bzw. die Oberflächenrekonstruktion einmal präpariert, kann sie nicht wie üblich mittels mehrerer „flash annealing“ Zyklen wieder gesäubert bzw. beseitigt und anschließend erneut präpariert werden. Der Grund dafür ist, dass Goldatome in den Germaniumkristall hinein diffundieren können und auf diese Weise nicht mehr herausgelöst werden können [98, 99, 100]. Dies geschieht schon bei Raumtemperatur. Die Au-Atome dringen in das Festkörperlattice ein und lösen Ge-Atome heraus. Bei höheren Temperaturen bewegen sich allmählich immer mehr Au-Atome unter die Ge-Oberfläche und begünstigen die Ausbildung von Fehlstellen an der Oberfläche. Das Wachstum der atomaren Drähte auf der Oberfläche wird dadurch stark gestört.

Die Probe muss also, sollte die Präparation nicht funktioniert haben oder die Probe anderweitig beschädigt sein, ausgeschleust werden und kann nicht erneut verwendet werden.

4.4. Ag/Si(001) - Ag-Nanodrähte

Für die Präparation von in einer Dimension stark ausgedehnten Silberinseln, im weiteren Verlauf Ag-Nanodrähte genannt, wurde ein stark fehlgeneigtes (4°) Siliziumsubstrat in (001)-Orientierung genutzt. Die Proben wurden uns von *PD Dr. Meyer zu Heringdorf* aus der Arbeitsgruppe von *Prof. Dr. M. Horn-von Hoegen* zur Verfügung gestellt.

Nach Einbau in den Halbleiterprobenträger, grober Reinigung mit Isopropanol und Stickstoff und Einschleusen in die Präparationskammer werden auch diese Proben zunächst auf 370 K geheizt. Über den Umweg mittels Erwärmung durch die Widerstandsheizung wird die intrinsische Leitfähigkeit des Kristalls soweit erhöht, dass er mittels Direktstrom geheizt werden kann. Bei ca. 770...870 K wird die Probe über mehrere Stunden ausgegast. Anschließend folgen auch hier mehrere „flash anneal“-Zyklen. Während des folgenden Aufdampfprozesses von Silber wird die Probe bei einer Temperatur von ca. 820 K gehalten. *Roos et al.* haben das auf Selbstorganisation basierende Wachstum von Silber auf fehlgeneigtem Silizium erstmals beschrieben [103]. Die Probe weist zumeist Doppelstufen auf [104], die Terrassenbreite beträgt ungefähr 36 \AA [105]. Aufgrund der Doppelstufen tritt nur eine der beiden möglichen Orientierungen der Si(001)-(2×1) Rekonstruktion auf der Oberfläche auf; die Dimerreihen des Siliziums liegen senkrecht zu den Stufen [103].

Die Probenoberfläche wird zunächst mit 0.5 ML Silber mit einer (2×3)-Rekonstruktion benetzt [106, 107]. Nach Ausbildung dieser Lage beginnt das überschüssige Silber quadratische und zum Teil auch längliche Inseln zu bilden. Dies liegt an einer ausgeprägten Diffusionsanisotropie auf dieser Oberfläche, so dass die auftreffenden Silberatome eine Bewegung entlang der Stufenkanten bevorzugen. *Roos et al.* folgend wachsen die Ag-Nanodrähte parallel zu den Stufenkanten des Substrats in $(\bar{1}10)$ -Richtung.

Abbildung 4.4a zeigt die Ag/Si-Oberfläche der auf die beschriebene Weise präparierten Probe aufgenommen mit dem SEM. Man erkennt gut einen typischen, langgezogenen Ag-Nanodraht, hier bereits von zwei Spitzen des *Nanoprobe*-Systems kontaktiert. Abbildung 4.4b zeigt eine STM-Aufnahme eines Teils eines solchen Ag-Nanodrahtes. Die Linienprofile in Abbildung 4.4c zeigen den Querschnitt, der üblicherweise beobachtet wird. In der Regel sind solche Nanodrähte einige hundert Nanometer hoch und breit und mehr als $50 \mu\text{m}$ lang [101, 92, 102].

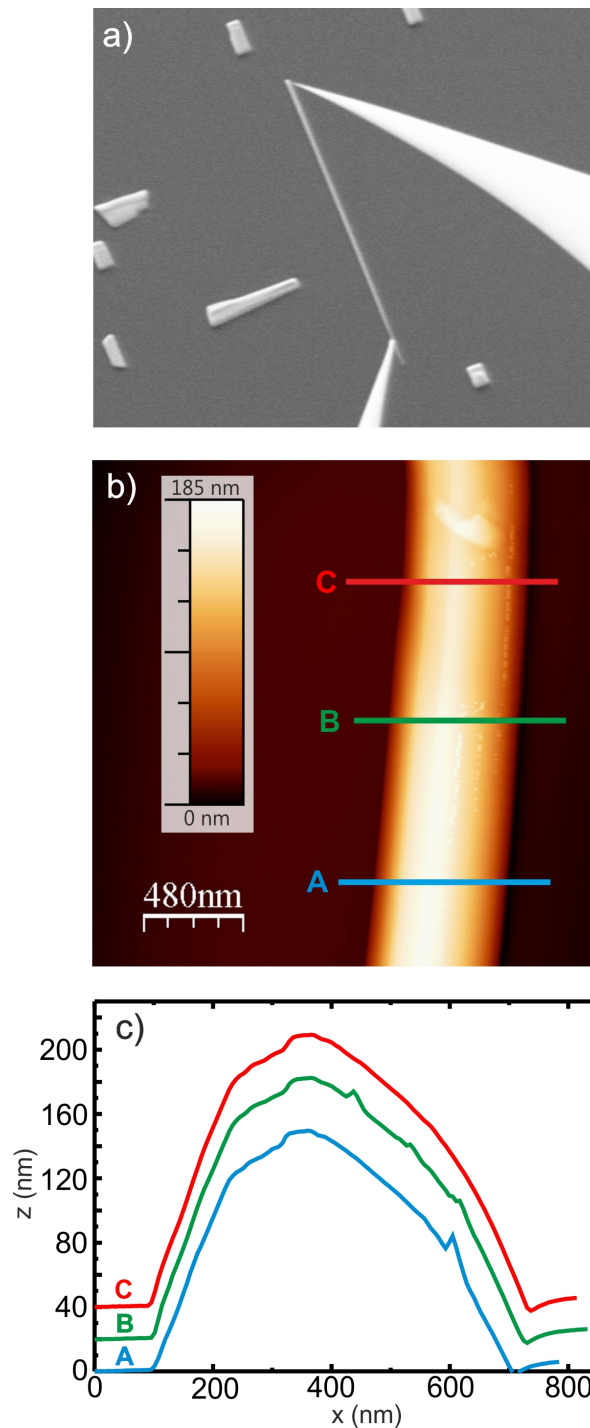


Abbildung 4.4.: a) SEM-Aufnahme der Probenoberfläche, mittig ein bereits kontaktierter Ag-Nanodraht, Bildgröße $100 \times 80 \mu\text{m}^2$. b) STM-Aufnahme eines kleinen Teils eines Ag-Nanodrahts. c) Linienprofile an den in b) eingezeichneten Stellen über den Ag-Nanodraht. Zum Teil veröffentlicht in [101] und [102].

5. Rastertunnelpotentiometrie (Ergebnisse und Diskussion)

5.1. Temperaturabhängige Potentiometrie auf Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag

Nachdem das zweidimensionale Elektronengas (2DEG) an der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche mit Hilfe der Rastertunnelpotentiometrie bei Raumtemperatur am *Nanoprobe-System* untersucht wurde¹ [4, 108, 33], sollte das temperaturabhängige Verhalten der elektrischen Leitfähigkeit untersucht werden.

Die Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberflächenrekonstruktion

Im Folgenden findet sich zunächst ein Überblick über die atomare und elektronische Struktur der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche [4, 92, 21, 109, 110].

Für die ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Rekonstruktion von Ag auf Si(111) existieren zwei Vorschläge für ein atomares Strukturmodell: Das *honeycomb chained triangle (HCT)* und das *inequivalent triangle (IET)* Modell. Beide Strukturen werden in Abbildung 5.1 gezeigt.

Die Einheitszelle der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche ist (im Realraum) kleiner als die der Si(111)-(7 × 7) und größer als die der Si(111)-(1 × 1)-Oberfläche. Die LEED-Reflexe erster Ordnung liegen gemäß Kapitel 4.2 bei $1/\sqrt{3}g_{Si}$ in hexagonaler Anordnung vor und sind gegenüber den (1 × 1)-Reflexen um 30° gedreht. Die Rekonstruktion besteht in beiden diskutierten Strukturmodellen aus je drei Silberatomen pro rekonstruierter ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Einheitszelle. Die Zahl der Silberatome pro Fläche bleibt somit erhalten, da die Einheitszelle der rekonstruierten ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Oberfläche um den Faktor drei größer ist

¹Die Arbeiten an diesem System wurden in Kooperation mit der Arbeitsgruppe um Prof. Dr. R.G. Ulbrich und Dr. M. Wenderoth von der Georg-August-Universität Göttingen durchgeführt.

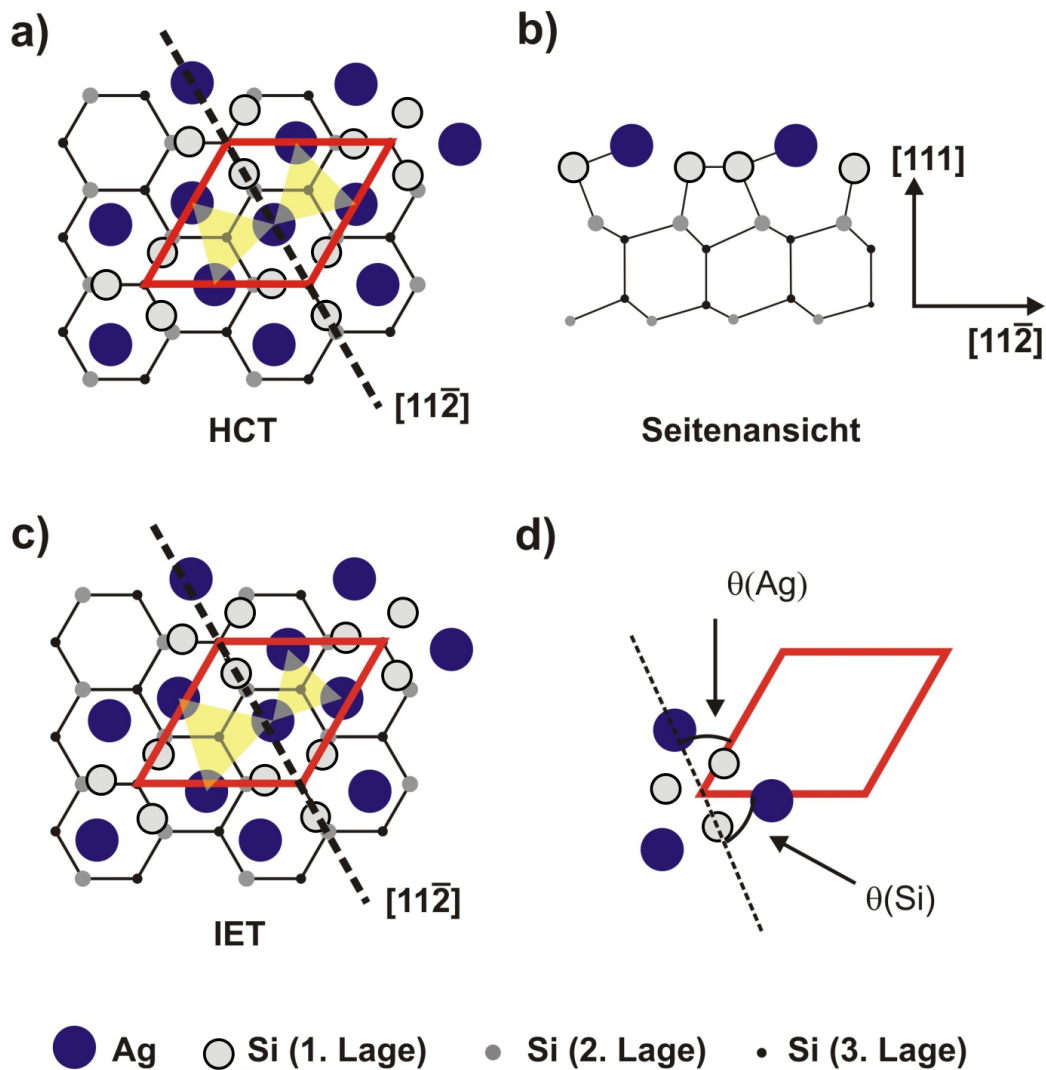


Abbildung 5.1.: (Abbildung basierend auf [109]) Vergleich von HCT- und IET-Strukturmodell der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche. a) zeigt die Struktur gemäß HCT-Modell, in b) ist die entsprechende Seitenansicht gezeigt. c) zeigt das IET-Strukturmodell. d) dient zur Definition der Winkel $\theta(\text{Ag})$ und $\theta(\text{Si})$. Die Einheitszelle ist in rot dargestellt und ist rautenförmig. Die Kantenlänge beträgt 6.65 \AA .

als die der unrekonstruierten (1×1) -Oberfläche. Die Silberatome binden jeweils über eine Bindung an darunter liegende Siliziumatome. Diese Lage Siliziumatome bildet Trimere aus. Im Rahmen des HCT-Modells sind diese Trimere identisch. Folgt man dem IET-Modell sind die Si-Trimere gegenüber dem Siliziumkristall um $\pm 6^\circ$ rotiert und haben zudem unterschiedliche Größen. Die Rotationen um $+6^\circ$ und -6° sind gleichwertig, so dass zwei Domänen existieren: IET^+ mit den Winkeln $\Theta(\text{Ag}) = 66^\circ$, $\Theta(\text{Si}) = 54^\circ$ und IET^- mit $\Theta(\text{Ag}) = 54^\circ$, $\Theta(\text{Si}) = 66^\circ$. Die Winkel sind in Abbildung 5.1d definiert.

Welches dieser beiden Strukturmodelle zutreffend ist, ist immer noch Bestandteil wissenschaftlicher Diskussion. In frühen Veröffentlichungen wurde die Struktur der Oberfläche mittels HCT-Modell beschrieben [111, 112, 113]; neuere Arbeiten sprechen von der IET-Struktur [114, 115]. Mittels STM wurde sowohl die HCT-Struktur bei Raumtemperatur [116] als auch die IET-Struktur bei niedrigeren Temperaturen (62 K und 6 K) beobachtet [117]. Darüber hinaus wurde die Existenz der IET-Struktur bereits mehrfach experimentell bestätigt, u.a. mittels diverser Beugungsmethoden [118, 119, 120]. Später wurde vermutet, dass ein schnelles Schalten zwischen zwei möglichen IET-Domänen bei hohen Temperaturen im (langsam abbildenden) STM zur HCT-Struktur gemittelt wird. Bei tiefen Temperaturen sollen diese IET-Schaltvorgänge ausgefroren werden und im STM die IET-Struktur sichtbar werden. Der Phasenübergang zwischen HCT- und IET-Struktur wird unter 150 K vermutet [121]. 2006 allerdings zeigten *Zhang et al.* STM-Daten bei Raumtemperatur, die die IET-Struktur wiedergeben [122, 121]. Sie zeigten sogar ein bei Raumtemperatur aufgenommenes STM-Bild, in dem beide Strukturen zu sehen waren. Ihre Erklärung basiert auf einem Spitzenwechsel an der Tunnelspitze während der Aufnahme [121]. Dies steht im Widerspruch zur Idee, dass ein Phasenübergang von HCT zu IET-Modell beim Übergang von hohen zu niedrigen Temperaturen überhaupt existiert. Abschließend konnte die Frage, ob im System $\text{Si}(111)-(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{-Ag}$ ein (struktureller) Phasenübergang stattfindet, in der Literatur bisher nicht geklärt werden.

Besonderes Augenmerk gilt neben den strukturellen auch den elektronischen Eigenschaften des Systems. Mittels winkelaufgelöster Photoelektronenspektroskopie konnte gezeigt werden, dass die rekonstruierte Oberfläche einen zweidimensionalen, metallischen Oberflächenzustand aufweist, der fast vollständig vom Volumen-Si-Festkörper entkoppelt ist [123]. Zusätzliche, für die Ausbildung der Rekonstruktion nicht benötigte Ag-Adatome geben als Donatoren im Mittel ein Elektron pro Adatom an den Oberflächenzustand ab. Die Silberkonzentration pro unrekonstruierter $\text{Si}(111)$ -Einheitszelle (Dotierung) ändert somit das chemische Potential des Oberflächenzustands [114, 124, 125, 126, 127, 123].

Wells et al. beobachten eine starke Änderung der Leitfähigkeit in Vier-Punkt-Geometrie bei ca. $220 \pm 20 \text{ K}$ und bringen dies mit dem Übergang von IET- zu HCT-Struktur („surface phase transition“) in Verbindung [128, 129]. Hier ändert sich die von *Wells et al.* gemessene Leitfähigkeit des Systems um fast drei Größenordnungen. Ihre Messmethode liefert allerdings keine lokale Information zur Änderung der Leitfähigkeit. Eine alternative Erklärung für die abrupte Änderung der Leitfähigkeit bei einer Temperatur von ca. 220 K liefern sie in einem *Corrigendum* zu Veröffentlichung [128]: Im Bereich der Fermienergie dominiert der Oberflächenzustand die elektronische Struktur. Dieser Oberflächenzustand ist extrem sensitiv auf die Präparation der Oberfläche bzw. die Menge an überschüssigem Silber, die angeboten wird [130]. Bei einer Bedeckung von genau einer Monolage Ag liegt die Fermienergie genau bei der Unterkante des elektronischen Bandes der Oberflächenzustände [129]. Damit wäre der Oberflächenzustand bei 0 K unbesetzt. Bei einer Temperatur größer 0 K besetzen thermisch angeregte Ladungsträger den Oberflächenzustand. Auch gezieltes Dotieren der Oberfläche mit Ag verschiebt die Fermienergie hin zu höheren Werten; dabei wird die Anzahl freier Ladungsträger stark erhöht. Somit könnte die starke Änderung der Leitfähigkeit durch das thermische Leeren des Oberflächenzustands bei sinkender Temperatur hervorgerufen werden.

Schließlich wird von *Ph. Hofmann und J. Wells* in [129] nochmals resümiert, dass die Ursache der Leitfähigkeitsänderung nicht klar benannt werden kann. Es wird auch in Frage gestellt, ob ein Phasenübergang, der Auswirkungen auf die Leitfähigkeit hat, in diesem System überhaupt existiert.

Ähnliche 4-Punkt-Leitfähigkeitsmessungen wurden auch von *Matsuda et al.* durchgeführt, die ebenfalls eine Änderung der Leitfähigkeit in Abhängigkeit der Temperatur und der Ag-Bedeckung fanden [131].

5.1.1. Ergebnisse

Charakterisierung mittels *I-V*-Kennlinien

Wie bereits erwähnt haben *Wells et al.* [128] die elektrische Leitfähigkeit dieses Systems bei verschiedenen Temperaturen unterhalb der Raumtemperatur mit Hilfe von Vier-Punkt-Messungen (4PP) bestimmt. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.2a (blaue Kurve) gezeigt. In Abbildung 5.2b sieht man eine im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Messung. Hierzu wurden zwei Goldspitzen des Nanoprobe-Systems in Kontakt mit Silberinseln gebracht

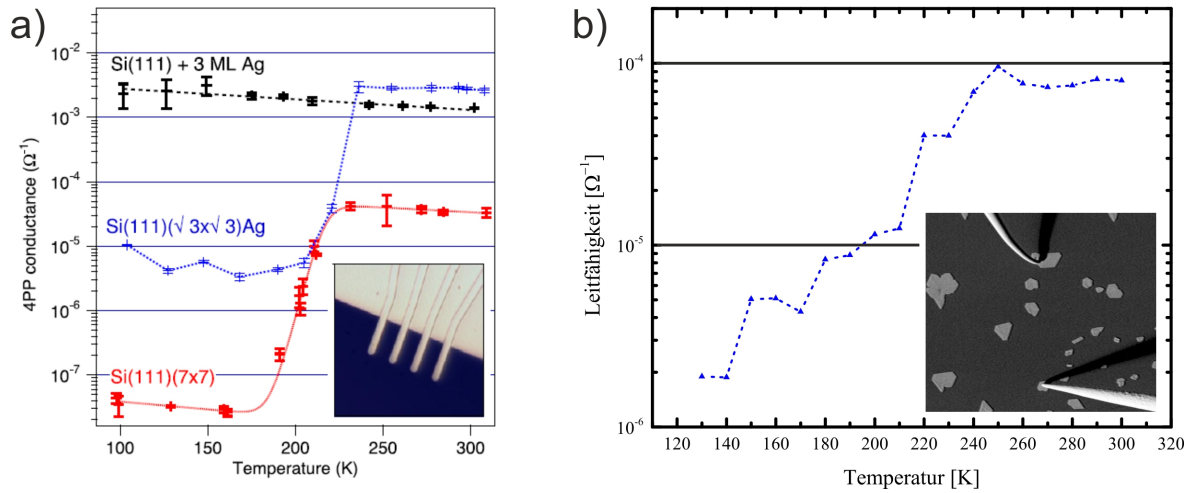


Abbildung 5.2.: a) (aus [128]) und b) Vergleich gemessener elektrischer Leitfähigkeiten in Abhängigkeit der Proben­temperatur für die $\text{Si}(111)$ -($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche, halb­logarithmisch aufgetragen, in Vier-Punkt- (a) und in Zwei-Punkt-Geometrie (b).

und der Widerstand zwischen ihnen in Abhängigkeit von der Temperatur ermittelt. Es handelt sich also um eine Zwei-Punkt-Messung (2PP). In beiden Experimenten erkennt man eine Leitfähigkeitsänderung zwischen 200 K und 250 K; die Leitfähigkeit fällt hier hin zu niedrigeren Temperaturen immer weiter ab. Oberhalb von 250 K bleibt die Leitfähigkeit nahezu konstant. Die Leitfähigkeit nimmt bei *Wells et al.* um knapp drei Größenordnungen ab, wohingegen unsere Messungen eine Abnahme von ungefähr zwei Größenordnungen im untersuchten Temperaturintervall von 130 K bis 300 K zeigen.

Um die Messkurve in Abbildung 5.2b zu erhalten wurden in Zwei-Punkt-Geometrie Strom-Spannungs-Kennlinien des Systems in Abhängigkeit der Proben­temperatur gemessen. Abbildung 5.3a zeigt polynomiale Fits 4. Ordnung der so gewonnenen Messpunkte. Auf die Darstellung aller beitragenden Messpunkte in der Abbildung wurde für eine bessere Übersicht verzichtet. Die Fit-Funktion hat jeweils die Form $f(x) = A + Bx + Cx^2 + Dx^3 + Ex^4$. In Abbildung 5.3b sind die Koeffizienten B der linearen Terme der Fit-Funktion als Funktion der Proben­temperatur aufgetragen. Ab 220 K erkennt man auch hier den Bereich des Phasenübergangs, gekennzeichnet durch kurzzeitig höhere Werte der Koeffizienten.

Die Auftragung der Leitfähigkeit als Funktion der Temperatur in Abbildung 5.2b resultiert schließlich aus einem Schnitt durch die Strom-Spannungs-Kennlinien bei einer Spannung von +2 V. So ist es möglich die Leitfähigkeit für jede Spannung und gemessene Temperatur aufzutragen.

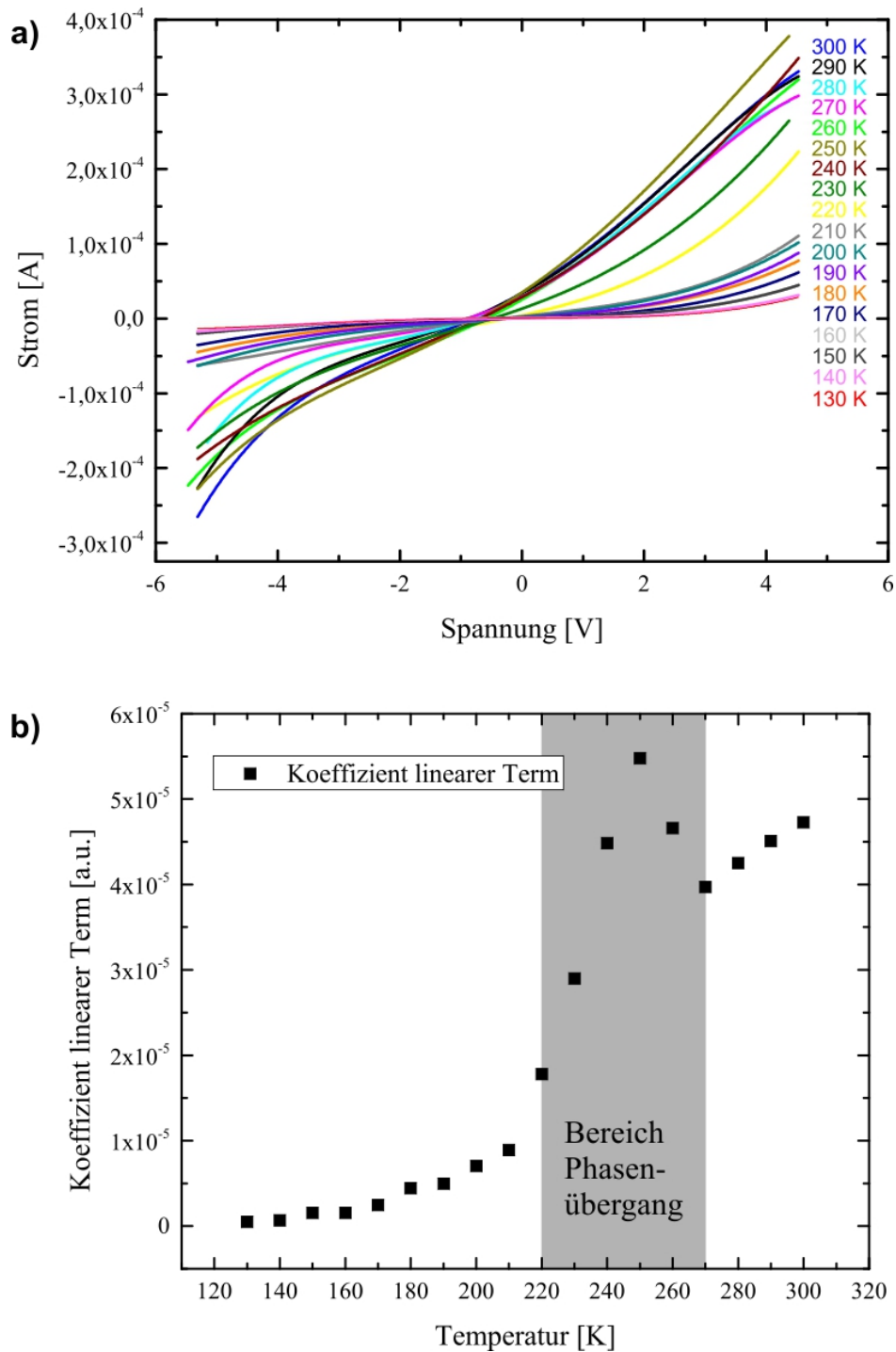


Abbildung 5.3.: a) Strom-Spannungs-Kennlinien als polynomiale Fits (4. Ordnung) in Abhängigkeit der Probestemperatur. b) Auftragung der Fitkoeffizienten der linearen Terme als Funktion der Probestemperatur.

Der mit Hilfe der Auftragung in Abbildung 5.2b bestimmte Temperaturbereich, in dem sich die Leitfähigkeit des Systems deutlich ändert, deckt sich mit dem von *Wells et al.* beobachteten ($220 \pm 20 \text{ K}$).

Makroskopische Charakterisierung mittels manueller Potentialbestimmung

Ebenfalls hilfreich für eine Einschätzung des Verhaltens der Leitfähigkeit sind Potentialbestimmungen, die auf makroskopischer Skala durchgeführt werden, im Folgenden manuelle Potentialbestimmung genannt. In diesem Fall wurde das Potential an der Oberfläche, ähnlich der Rastertunnelpotentiometrie, mit Hilfe einer Tunnelspitze zwischen zwei Kontaktspitzen abgegriffen. Im Gegensatz zur Rastertunnelpotentiometrie wird hier allerdings nicht der Tunnelstrom automatisch auf null geregelt, sondern manuell über ein Potentiometer, während die Tunnelspitze im Tunnelkontakt an einer festen Position steht, also nicht rastert. Der Vorteil dieser Methode gegenüber der Rastertunnelpotentiometrie ist, dass ein viel größerer Bereich der Probe in kurzer Zeit vermessen werden kann. Im Rahmen der STP ist die Größe des Scanbereichs bzw. die Zeit limitierend; bei der beschriebenen manuellen Potentialbestimmung kann nahezu die gesamte Strecke zwischen den Kontaktspitzen in kurzer Zeit untersucht werden, indem das Potential stellenweise, an viele μm voneinander entfernten Punkten, gemessen wird. Dies wurde für zwei verschiedene Temperaturen, 300 K und 130 K, durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.4 zusammengestellt.

Abbildung 5.4a zeigt die manuelle Potentialbestimmung für die Probentemperatur von 130 K. Als Spannungsdifferenz wurden über die Goldkontaktspitzen $+9.3 \text{ V}$ bzw. -9.3 V an die Oberfläche angelegt. Die Kontaktspitzen befanden sich in einem Abstand von ca. $130 \mu\text{m}$. Dargestellt sind die Ergebnisse für beide Polaritäten des Querstroms, verdeutlicht durch die rote bzw. blaue Einfärbung. Im Falle von 130 K zeigen beide Kurven in ihrem Verlauf zunächst einen starken Abfall des Potentials auf einer relativ kurzen Strecke am negativen Pol, markiert durch — für beide Polaritäten. Die Querströme unterscheiden sich für die beiden Polaritäten der Spannung. Im weiteren Verlauf zeigen beide Kurven auf einer bestimmten Strecke (ausgeschnitten in der Vergrößerung) einen nahezu linearen Verlauf des Potentials. Die beiden Insets zeigen jeweils diese Vergrößerung des interessierenden Kurvenverlaufs. Die jeweilige Potentialdifferenz ΔV wird zwischen Minimal- und Maximalwert des linearen Bereichs der Kurven wie eingezeichnet bestimmt. Für die Probentemperatur 130 K folgen die Potentialdifferenzen 330 mV und 130 mV für die beiden Polaritäten und

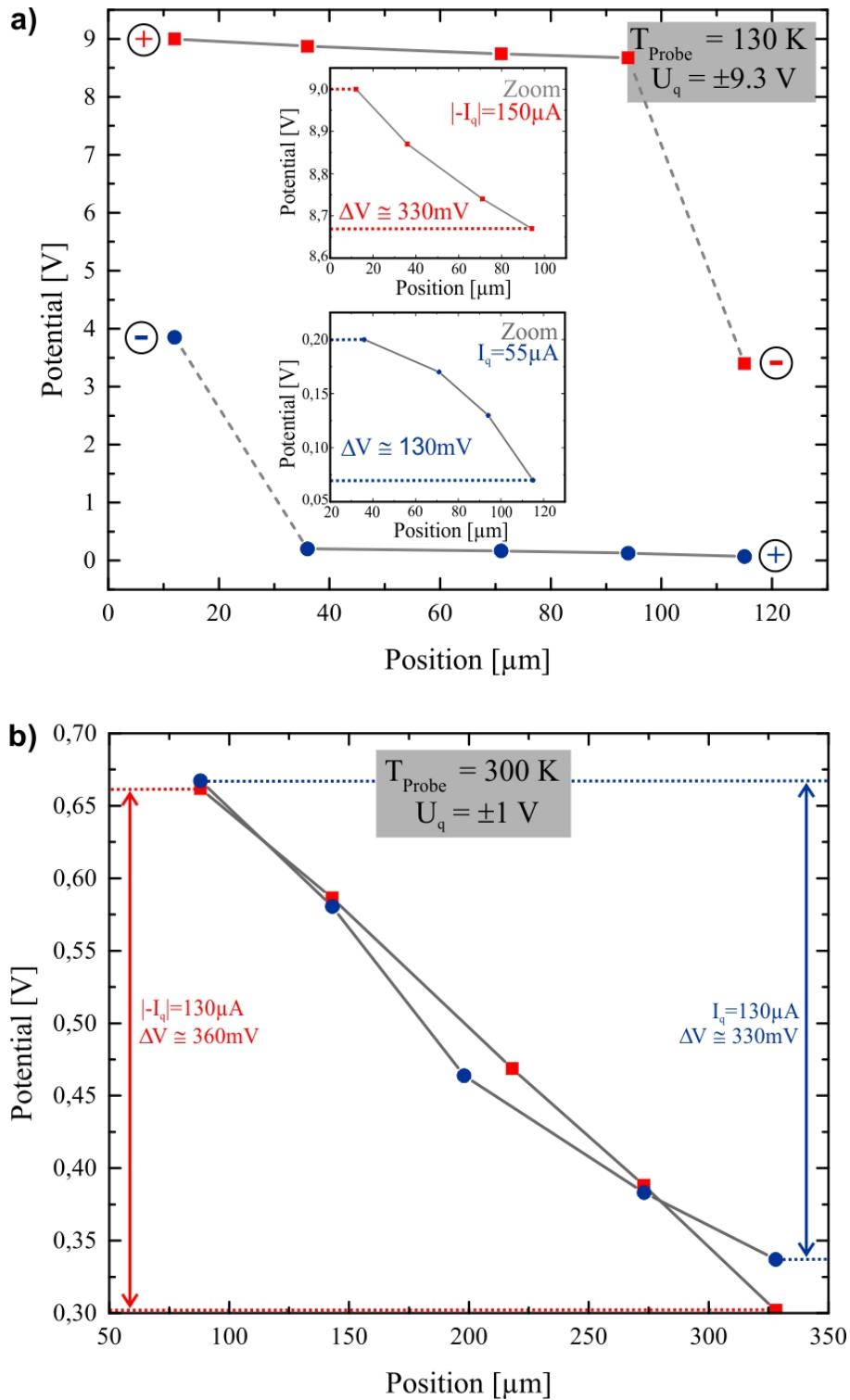


Abbildung 5.4.: Manuelle Bestimmung des Potentialabfalls an der Oberfläche zwischen den Kontaktspitzen für die Temperaturen a) 130 K und b) 300 K. Die Insets in a) zeigen jeweils die Vergrößerung des „nahezu“ linearen Bereichs der Kurven. Kontaktspitzenabstände: a) 130 μm , b) 335 μm .

Probentemperatur in K	$ I_q $ in μA	ΔU in mV	Strecke in μm	Widerstand $\frac{\Delta U}{ I_q }$ in k Ω
300	130	330	240	2.5
300	130	360	240	2.8
130	150	330	80	2.2
130	55	130	80	2.4

Tabelle 5.1.: Vergleich der Ergebnisse der manuellen Potentialbestimmung für 300 K und 130 K für je beide Polaritäten des Stroms.

für eine Strecke von je ca. 80 μm .

Abbildung 5.4b zeigt eine identische Messung für die Probentemperatur 300 K. Die an die Oberfläche angelegte Spannung betrug +1 V bzw. −1 V, der Abstand zwischen den Kontaktspitzen 335 μm . Hier resultieren Potentialdifferenzen von 360 mV und 330 mV für eine Strecke von je ca. 240 μm . Das System zeigt bei dieser Temperatur keinen Diodencharakter. Tabelle 5.1 zeigt die gewonnenen Ergebnisse der manuellen Potentialbestimmung zusammengefasst.

Mikroskopische Charakterisierung mittels STP

Die Rastertunnelpotentiometrie bietet sich hier an, um die elektronischen Eigenschaften der Oberfläche orts aufgelöst zu untersuchen und so die bisher fehlende lokale Information zu gewinnen. Im Rahmen der Promotion sollte die temperaturabhängige Leitfähigkeitsänderung der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberflächenrekonstruktion erstmals mittels STP untersucht werden. Dies könnte klären, in welcher Form sich die Leitfähigkeit auf mikroskopischer Skala bei Variation der Probentemperatur ändert.

Basierend auf den vorangehenden Messungen wurden daher Rastertunnelpotentiometrie-messungen an diesem System in Abhängigkeit der Probentemperatur durchgeführt. Dazu

Probentemperatur in K	Querspannung in V	Querstrom in μA	Widerstand in $k\Omega$	Abbildung
300	+1	150/ – – –	6.7	5.5
230	± 1	65/ – 55	15.4/18.2	5.6
210	± 1	60/ – 40	16.7	5.6
155	± 1	35/ – 15	28.6/66.7	5.5

Tabelle 5.2.: Experimentelle Parameter der STP-Messungen in Abhängigkeit der Temperatur für die Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche.

wurden erneut zwei Silberinseln auf der Oberfläche mit Kontaktspitzen des Nanoprobe-Systems so kontaktiert, dass der resultierende Strom in senkrechter Orientierung zu Stufenkanten der Oberfläche fließt. Der Spitzenabstand betrug $330 \mu m$. Die schnelle Rasterrichtung wurde während der Potentiometrie ebenso gewählt, so dass auch hier die Orientierung senkrecht zu den Stufenkanten lag. Dies ermöglicht die Abbildung des größtmöglichen Potentialabfalls im untersuchten Scanbereich und pro Linie des Scans. In allen Messungen wurde die über die Kontaktspitzen angelegte Querspannung konstant auf einem Wert von $+1 V$ bzw. $-1 V$ gehalten, um die Vergleichbarkeit der Messdaten für die verschiedenen Temperaturen zu gewährleisten. Nun wurde die Probentemperatur sukzessive variiert. Die Potentialkarten wurden für beide Polaritäten der Querspannung aufgenommen (außer $300 K$), um Messartefakte ausschließen zu können und die beobachteten Thermospannungseffekte bestimmen zu können.

Die Tabelle [5.2](#) gibt die experimentellen Parameter für diese Versuchsreihe wieder. Gezeigt ist für jede Probentemperatur die angelegte Querspannung, der resultierende Querstrom und der (berechnete) Widerstand. Zusätzlich wird auf die Abbildung verwiesen, in der die entsprechenden Potentialkarten gezeigt werden. In Abbildung [5.5](#) sind eine repräsentative Topografie (a), aufgenommen im STP-Modus) und die Potentialkarten

(b-d) für die verschiedenen Probertemperaturen von 300 K und 155 K gezeigt, gemessen in STP-Konfiguration. Für 300 K wurde nur in einer Polarität gemessen: Zum einen sind die Ergebnisse bei dieser Temperatur bereits bekannt und veröffentlicht [4], zum anderen wird hier keine Thermospannung erwartet. Bei 155 K dagegen wurden beide Polaritäten untersucht. Analog zeigt Abbildung 5.6 die Potentialkarten für die Probertemperaturen 210 K und 230 K. Auch hier sind die Potentialkarten für beide Polaritäten des Querstroms abgebildet. Die gezeigten Bereiche der Oberfläche, in denen die Potentialkarten aufgenommen wurden, unterscheiden sich leicht. Dies liegt daran, dass bei Änderung der Probertemperatur die Tunnelspitze zurückgezogen und nach Erreichen der eingestellten Temperatur wieder angenähert wurde. Dabei kann sich die Position der Spitze über der Probe leicht ändern. Wesentlicher ist die Drift² der Probe bei Temperaturänderung, die die Stelle, an der gemessen wird, entsprechend ändert.

In Abbildung 5.5b, bei einer Temperatur von 300 K, zeigt das Linienprofil des elektrochemischen Potentials der Oberfläche den bekannten stufenartigen Verlauf. Potentialsprünge erfolgen an den Stufenkanten, auf den Terrassen erscheint das Potential nahezu konstant. Zusätzlich sind die Übergänge im Potential an den Stufenkanten scharf lokalisiert (Breite des Potentialübergangs 6 \AA gemäß [4]). Dies bestätigt die bereits von uns in [4] veröffentlichten Messungen bei Raumtemperatur an diesem System und gilt gleichzeitig als Verifikation dafür, dass die Messmethode in der vorliegenden Versuchsreihe ordnungsgemäß funktionierte. Das Rauschlevel des Potentialsignals kann auf ca. $20 \mu\text{V}$ geschätzt werden. Der in Abbildung 5.5b und den folgenden Potentialkarten untersuchte Probenbereich hat eine Größe von $200 \times 200 \text{ nm}^2$. Bei Raumtemperatur fällt auf einer Strecke von 200 nm ein Potential von ungefähr $900 \mu\text{V}$ ab, was dem Linienprofil des Potentials entnommen werden kann. Der Vergleich mit [4] passt gut, da hier auf der gleichen Strecke ein vergleichbares Potential abfällt.

Da hier das Verhalten der Leitfähigkeit als Funktion der Probertemperatur im Fokus steht, sollen die Potentialkarten der Temperaturen 155 K (Abbildungen 5.5c,d), 210 K (Abbildungen 5.6a,b) und 230 K (Abbildungen 5.5c,d) näher betrachtet werden. Passend dazu zeigt Abbildung 5.7 jeweils über mehrere Linien gemittelte Profile des Potentials für jede Temperatur und jede Polarität, gemessen an repräsentativen Stellen der Potentialkarten. Schon bei 230 K zeigt das Linienprofil keinen einfachen, stufenartigen Verlauf mehr.

²Unter *Drift* wird allgemein eine relative Bewegung der Spitze zur Probe verstanden. Diese Bewegung kann verschiedene Ursachen haben, z.B. thermische Expansion von einem der beiden Materialien. Siehe auch [132].

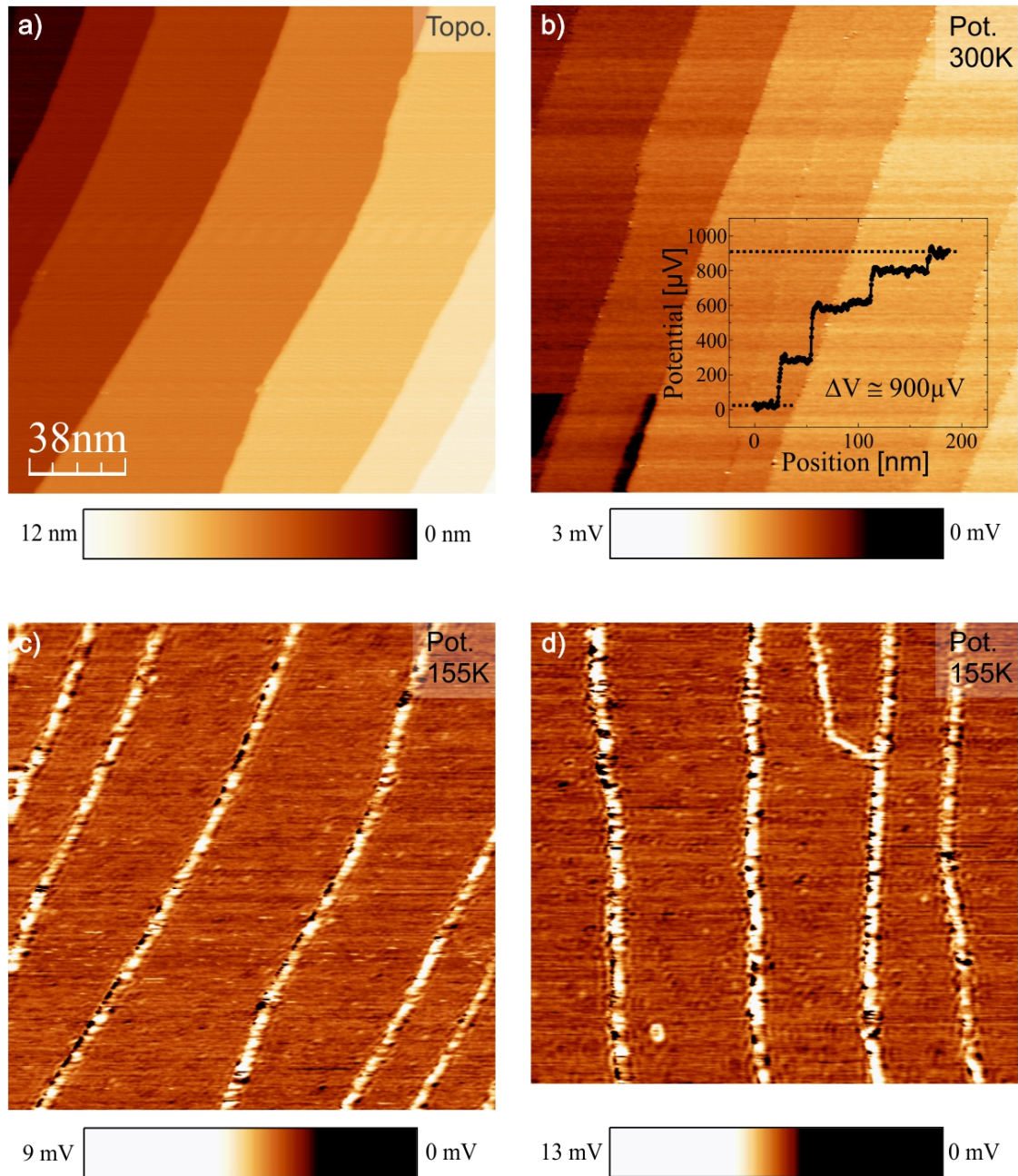


Abbildung 5.5.: Topografie und Potentialkarten der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche, bei verschiedenen Probertemperaturen aufgenommen. a) Typische Topografie der Probe, aufgenommen im STP-Modus. b) Potentialkarte, aufgenommen bei Raumtemperatur. Der Inset zeigt ein über mehrere Linien gemitteltes Profil des Potentials. c) und d) zeigen jeweils Potentialkarten, aufgenommen bei 155 K, für beide Polaritäten der Querspannung. Bei den Potentialkarten in c) und d) wurden Line-by-Line-Anpassungen in vertikaler Richtung durchgeführt. Die experimentellen Parameter können der Tabelle 5.2 entnommen werden.

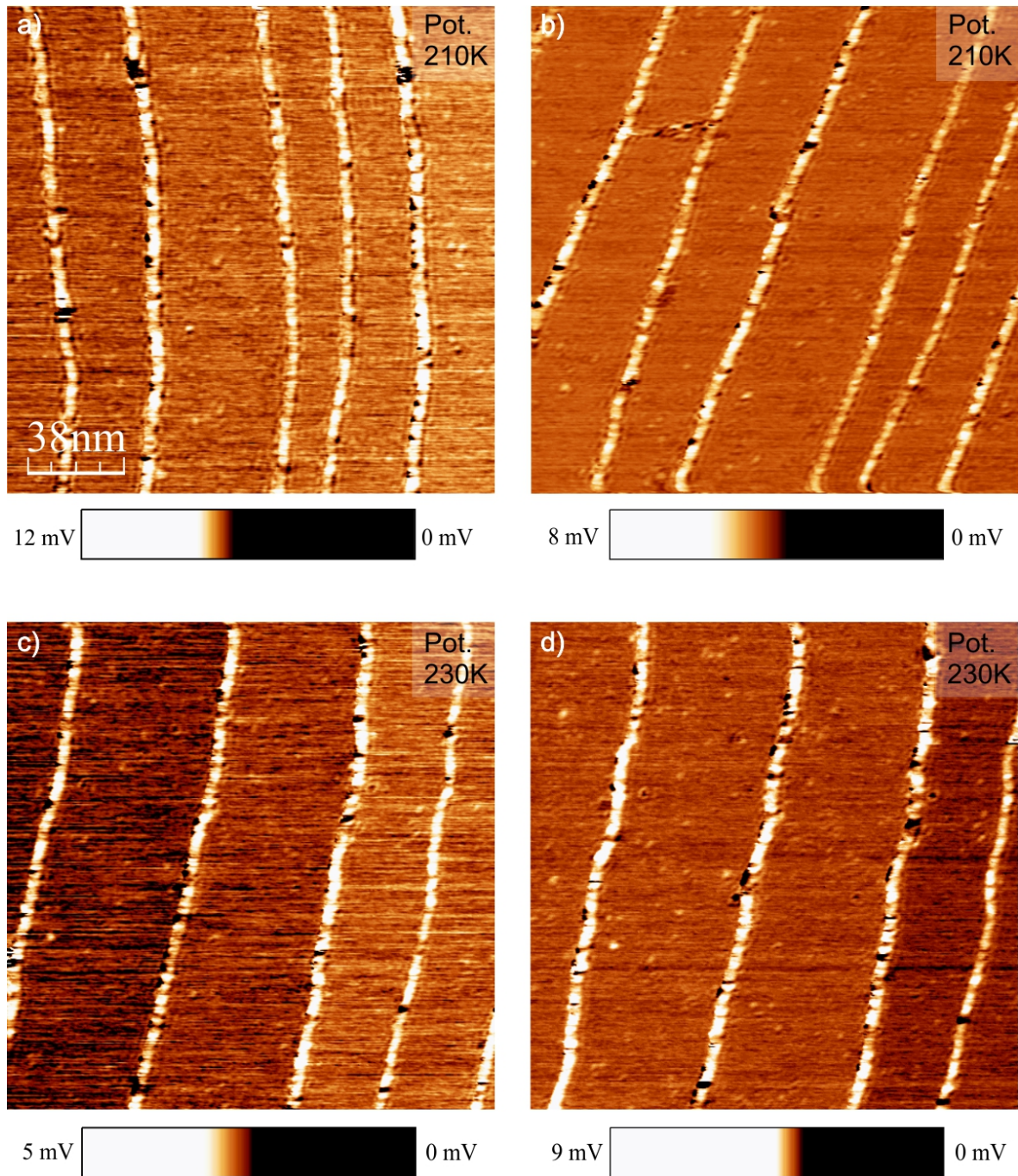


Abbildung 5.6.: Potentialkarten der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche, bei verschiedenen Probertemperaturen aufgenommen, für jeweils beide Polaritäten der Querspannung. Bei allen Potentialkarten wurden Line-by-Line Anpassungen in vertikaler Richtung durchgeführt. Die experimentellen Parameter können der Tabelle 5.2 entnommen werden.

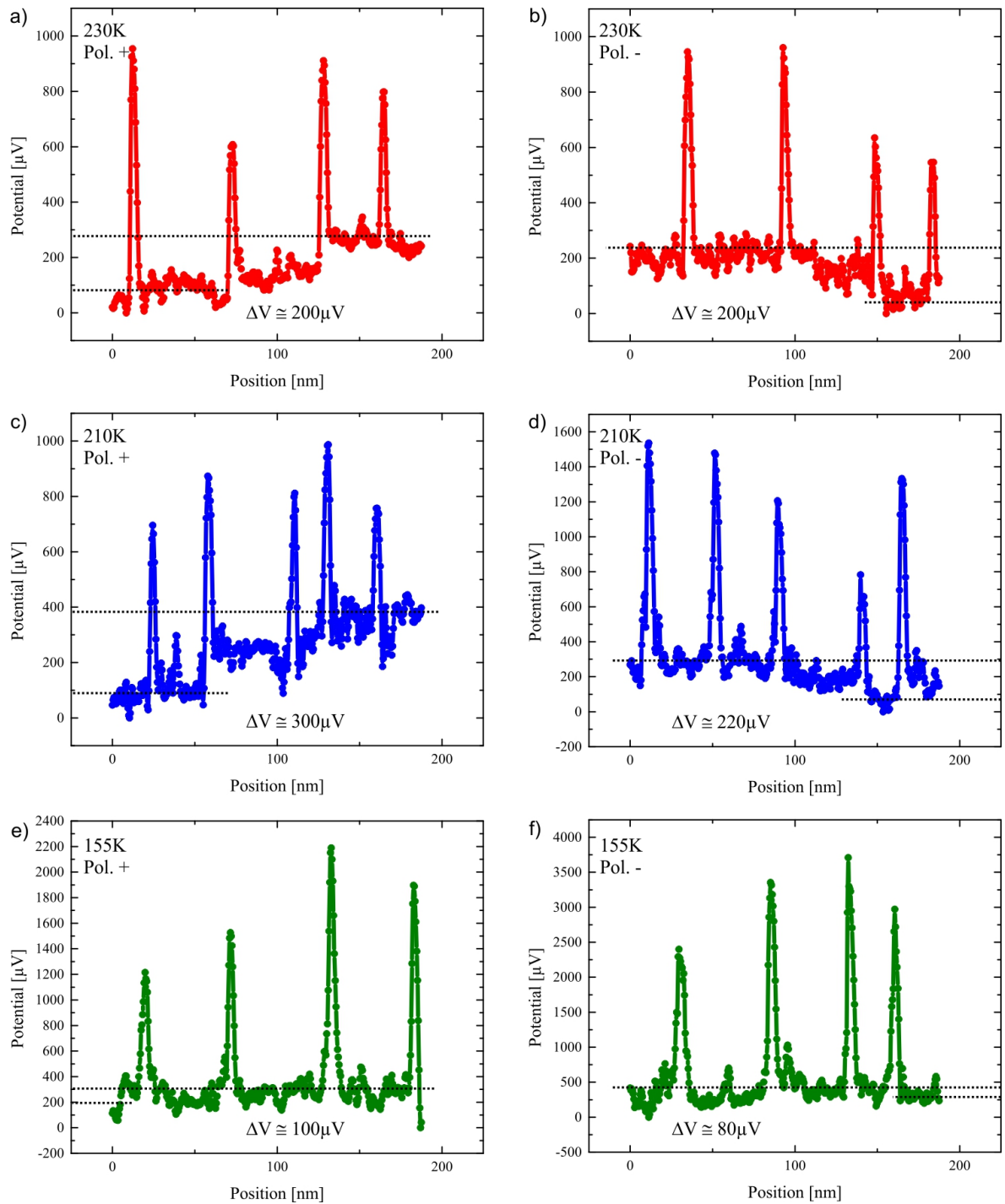


Abbildung 5.7.: Repräsentative Linienprofile des Potentials (vgl. Abbildungen 5.5 und 5.6) für die verschiedenen Proben Temperaturen und jeweils beide Polaritäten der Querspannung. Die zugrunde liegenden experimentellen Parameter können der Tabelle 5.2 entnommen werden.

Der Potentialabfall fällt hier deutlich geringer aus als noch bei Raumtemperatur und beträgt ca. $200\,\mu V$ auf einer Strecke von $200\,nm$. Bei weiter sinkender Temperatur ist der stufenartige Verlauf immer weniger ersichtlich. Bei den Temperaturen $210\,K$ und $155\,K$ sind die bei Raumtemperatur gefundenen Potentialsprünge an den Stufenkanten kaum mehr zu sehen. Bei $210\,K$ ergibt sich die Potentialdifferenz zu ca. $220\ldots 300\,\mu V$. Im Fall von $155\,K$ (Abbildungen 5.5c,d) beträgt die Potentialdifferenz auf einer Strecke von $200\,nm$ nur noch ca. $80\ldots 100\,\mu V$. Die Tatsache, dass bei $210\,K$ eine höhere Potentialdifferenz gemessen werden kann als bei $230\,K$, liegt an der allgemeinen Ungenauigkeit der Potentialbestimmung aus den Auftragungen in Abbildung 5.7 und an einer noch zu diskutierenden Kontaktierungsproblematik. Eine Bestimmung des Potentials mit einer Genauigkeit von weniger als $\pm 50\,\mu V$ Unsicherheit ist nur schwer möglich. Bei den gezeigten Potentialdifferenzen handelt es sich somit nur um grobe Abschätzungen.

Nun soll das Augenmerk auf den bei niedrigen Temperaturen neu hinzugekommenen hohen Potentialsignalen an den Stufenkanten liegen. Deutlich ist dies in den Linienprofilen in Abbildung 5.7 zu erkennen. Hierbei handelt es sich nicht um Messartefakte. Für beide Polaritäten des Querstroms weisen die Spitzen in den Linienprofilen in die gleiche Richtung. Sie entstammen dem überlagerten Thermospannungssignal, das auftritt, wenn sich die Temperaturen von Tunnelspitze und Probe unterscheiden (vgl. Kapitel 2.3). Diese Peaks zeigen hier eine Größe von bis zu $3\,mV$. Dies entspricht bei einer angenommenen Temperaturdifferenz von $120\,K$ zwischen Spitze und Probe $25\,\frac{\mu V}{K}$. Dieser Wert ist durchaus vergleichbar mit vorhandenen Literaturwerten z.B. für die reine Si(111)-(7 × 7)-Rekonstruktion [43].

5.1.2. Diskussion

Zunächst soll die von Wells et al. gefundene Übergangstemperatur diskutiert werden. In seiner Dissertationsschrift erklärt *J. Wells*, dass die Übergangstemperatur in seinen Experimenten stark streute und er sich somit nicht auf einen einzelnen Temperaturwert festlegen könne [133]. Laut Angabe liegt die Temperatur, bei der sich die Leitfähigkeit dieses Systems stark ändert, bei ungefähr $220 \pm 20\,K$. Unsere Messungen bestätigen diesen von *Wells et al.* ermittelten Temperaturbereich, in dem sich die Leitfähigkeit des *gesamten* Systems, ein-

schließlich Zuleitungen und Kontaktwiderständen, ändert³.

Zunächst soll das Augenmerk auf den Potentialkarten der Abbildungen 5.5 und 5.6 liegen. Dargestellt ist das elektrochemische Potential dieser Oberfläche bei verschiedenen Temperaturen. Es fällt auf, dass die Spannungsdifferenz ΔV , die insgesamt in jedem Bild zwischen linkem und rechtem Rand abfällt, bei den verschiedenen Temperaturen nicht konstant ist. Zur Erinnerung: Die STP-Messungen wurden alle bei konstanter Querspannung von $\pm 1\text{ V}$ und gleichem Abstand der Kontaktspitzen voneinander durchgeführt. Die äußere, über die Kontaktspitzen angelegte Spannung ist also in jeder Messung vergleichbar. Dennoch kann nicht die insgesamt zur Verfügung stehende Spannung an die Oberfläche angelegt werden und die tatsächliche Spannungsdifferenz über die beobachtete Strecke von 200 nm variiert stark mit der Temperatur.

Da die Proben temperatur zwischen den einzelnen Messungen geändert wurde und die Probe sich damit ausdehnt oder zusammenzieht, mussten nach einer erfolgten STP-Messung die Kontaktspitzen von der Oberfläche entfernt werden und nach Erreichen der avisierten Temperatur erneut gesetzt werden. Es wurde versucht, dies so reproduzierbar wie möglich zu gestalten, dennoch ist eine vollständige Reproduzierbarkeit nicht gegeben. Die Qualität der Kontakte und damit auch die Kontaktwiderstände können sich also von Messung zu Messung unterscheiden. Darüber hinaus wurden bei unserer Messung immer dieselben Ag-Inseln kontaktiert. Die auf der Oberfläche vorhandenen Inseln wurden als Kontaktbereiche ausgewählt, um die Rekonstruktion an der Oberfläche zu schonen und nicht versehentlich mit einer Spitze die Rekonstruktion, die nur eine Monolage dick ist, lokal zu schädigen bzw. durchzudrücken. Die vorsichtige Kontaktierung erfolgte immer über eine sensible Tunnelstrommessung (Verstärkung 10^6). Trotzdem scheinen die Kontaktwiderstände bei den verschiedenen Temperaturen derart unterschiedlich zu sein, dass die im Bildbereich in der Rekonstruktion abfallende Spannung merklich verschieden ist. Dies würde die in den Potentialkarten zu beobachtenden, unterschiedlichen Verläufe des Potentials erklären und wird im späteren Verlauf zentraler Aspekt dieser Diskussion.

Aufgrund der beschriebenen Auswirkungen der Kontaktwiderstände ist es umso wichtiger zu untersuchen, wie sich die Leitfähigkeit bzw. der Widerstand der Oberfläche in Abhängigkeit der Proben temperatur verhält, wenn diese explizit ausgeschlossen werden. Dies soll im folgenden Abschnitt behandelt werden.

³Hier wird vom *gesamten* System gesprochen. Wie später zu sehen sein wird ändert sich die elektrische Leitfähigkeit der Oberfläche kaum mit variierender Temperatur, weshalb die gemessene, globale Leitfähigkeitsänderung ihren Ursprung in den Kontakten hat.

Die Rastertunnelpotentiometrieergebnisse zeigen deutlich, dass sich die Leitfähigkeit der Oberfläche bei den Temperaturen 300 K, 230 K, 210 K und 155 K kaum unterscheidet, wenn man den *real* fließenden Strom im untersuchten Bildbereich berücksichtigt:

Dazu wurden die bereits 2009 erschienene Veröffentlichung [4] und die damaligen ergänzenden Messungen herangezogen. Für die Auswertung der damaligen Ergebnisse, die anhand der gleichen Oberflächenrekonstruktion bei Raumtemperatur erzielt werden konnten, wurde das Stromdichteprofil des über die Probe fließenden Querstroms ermittelt. Dies ist in Abbildung 5.8 gezeigt. Hierzu wurden senkrecht zur Verbindungsachse zwischen den Kontaktspitzen an mehreren Stellen der Probe die Potentialgradienten innerhalb von Streifen der Länge $2.5 \mu\text{m}$ und der Breite $0.5 \mu\text{m}$ bestimmt. Das entsprechende elektrische Feld, das durch den Gradienten des elektrochemischen Potentials gegeben ist, wurde anschließend in eine korrespondierende Stromdichte über $j = \sigma E$ umgerechnet. Die Annahme ist hier, dass die Leitfähigkeit σ im betrachteten Bereich im Mittel konstant ist. Die Stromdichte wurde dann als Funktion des Ortes senkrecht zur Verbindungslinie zwischen den beiden Kontaktspitzen aufgetragen, wie es in Abbildung 5.8b,c gezeigt ist. Die resultierende Auftragung kann mit Hilfe einer Lorentzkurve gefittet werden und die Fläche unter der Kurve muss dem gesamten Querstrom über die Probe entsprechen. Auf diese Weise kann die vertikale Achse der Auftragung skaliert werden. Im Falle des Transports in senkrechter Orientierung zu den Substratstufen (entspricht vorliegendem Fall) resultierte eine maximale Stromdichte von 0.4 A m^{-1} bei einem Abstand zwischen den Kontaktspitzen von $145 \mu\text{m}$ (vergleiche auch [110]). Die mittlere Halbwertsbreite der Lorentzverteilung betrug $159 \mu\text{m}$.

Für die Analyse der aktuellen Resultate sind die damaligen Ergebnisse sehr hilfreich. So ist es jetzt möglich, mit Hilfe der damals bestimmten Stromdichte und Kenntnis weiterer experimenteller Parameter (z.B. Querstrom, Spitzenabstand) Rückschlüsse zu ziehen für die aktuellen Messungen.

Alle im Folgenden dargestellten Ergebnisse finden sich in Tabelle 5.3 in übersichtlicher Form zusammengefasst.

Zunächst wird die aktuelle Stromdichte j_a berechnet. Dies wurde mit Hilfe zweier Korrekturfaktoren auf Basis der damaligen Stromdichte realisiert:

$$j_a = j_{ref} \cdot \frac{I_{ges}}{I_{ref}} \cdot \frac{l_{ref}}{l_a} \quad (5.1)$$

Hier ist $j_{ref} = 0.4 \text{ A m}^{-1}$ die in [4] und [110] bestimmte Stromdichte für die damaligen Messungen bei 300 K, I_{ges} der gesamte, in den aktuellen Messungen fließende Querstrom,

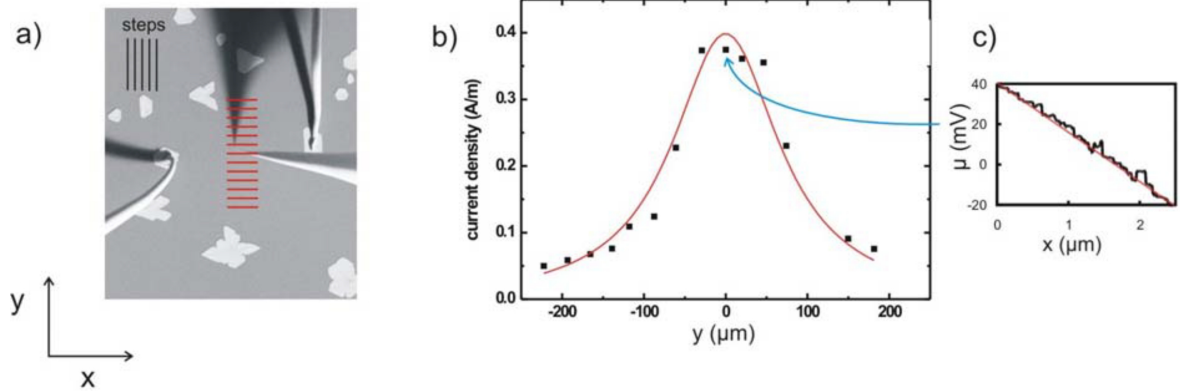


Abbildung 5.8.: Bestimmung der Stromdichteverteilung aus Rastertunnelpotentiometrieexperimenten an Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche bei Raumtemperatur (siehe auch [110, 92]).

$I_{ref} = 0.1 \text{ mA}$ der in den damaligen Messungen eingestellte Querstrom, $l_{ref} = 145 \text{ } \mu\text{m}$ der damalige und $l_a = 330 \text{ } \mu\text{m}$ der aktuelle Abstand zwischen den Kontaktspitzen.

Die Stromdichte j_a wird hier mittels zweier Terme auf Basis der alten Messergebnisse korrigiert bzw. angepasst. Zunächst wird dazu ein Stromkorrekturfaktor $\frac{I_{ges}}{I_{ref}}$ angesetzt; dies geschieht auf Basis der direkten Proportionalität der Stromdichte zur Stromstärke. Darüber hinaus wird die Stromdichte mit einem Längskorrekturfaktor $\frac{l_{ref}}{l_a}$ angepasst, da die Verteilung des elektrischen Feldes und damit auch die Stromdichteverteilung mit dem Abstand der Kontakte voneinander gemäß Gleichung A.4 skaliert. Die Begründung hierfür erfordert eine genauere Betrachtung der Geometrie des Problems, welche in Anhang A.2 dargestellt ist.

Mit Hilfe der oben beschriebenen Anpassungen folgen die Stromdichten j_a für die verschiedenen Probertemperaturen, dargestellt in Tabelle 5.3.

Mit den jetzt bekannten Stromdichten j_a kann der real im Bildbereich fließende Strom I_a nach Gleichung 5.2 bestimmt werden, da die Kantenlänge $b = 200 \text{ nm}$ des Bildausschnitts bekannt ist:

$$I_a = j_a \cdot b \quad (5.2)$$

Der Flächenwiderstand setzt sich zusammen aus tatsächlichem Spannungsabfall ΔV (kann Abbildung 5.7 entnommen werden) und dem Strom I_a :

$$R_{\square} = \frac{\Delta V}{I_a} \quad (5.3)$$

Auf Basis des in [4] bestimmten Widerstands einer atomaren Stufe von $3.125 \cdot 10^{-4} \Omega m^{-1}$ wird jetzt für einen Bildausschnitt der Breite $b = 200 nm$, der fünf bzw. vier Stufen beinhaltet⁴, der Flächenwiderstand $R_{\square,ref}$ bestimmt, der als Vergleichswert dienen soll.

$$R_{\square,ref,5} = \frac{5 \cdot 3.125 \cdot 10^{-4} \Omega}{b} = 7812.5 \Omega/\square \quad (5.4)$$

für fünf atomare Stufen bzw.

$$R_{\square,ref,4} = \frac{4 \cdot 3.125 \cdot 10^{-4} \Omega}{b} = 6250 \Omega/\square \quad (5.5)$$

für vier atomare Stufen.

Der letzte Schritt ist der Vergleich zwischen dem Flächenwiderstand R_{\square} , der für die aktuellen Messungen bestimmt wurde, mit dem Vergleichswert $R_{\square,ref,4/5}$:

$$\frac{R_{\square}}{R_{\square,ref,4/5}} = f \quad (5.6)$$

Auch der Vergleichsfaktor f findet sich in Tabelle 5.3.

Die Vergleichsfaktoren für die verschiedenen Proben Temperaturen und Polaritäten des Querstroms liegen alle im Bereich zwischen 1.1 und 2.1. Das zeigt, dass die Leitfähigkeit der Oberfläche, wenn man wirklich nur den Bildbereich betrachtet, der untersucht wurde, sich im Vergleich zwischen den verschiedenen Temperaturen um eben diese Faktoren unterscheidet. Dazwischen liegen demnach keine Größenordnungen Unterschied, wie es die Zwei-Punkt- und Vier-Punkt-Messungen vom Beginn dieses Kapitels vermuten lassen, die nicht nur einen abgeschlossenen Bereich auf der Probe umfassen, sondern die gesamte Probe inklusive aller Zuleitungen und Kontaktwiderstände. Dies ist ein weiterer Beleg dafür, dass die Kontaktwiderstände die beobachtete Leitfähigkeitsänderung verursachen und sich die Leitfähigkeit der Oberfläche eben nicht in Abhängigkeit der Temperatur drastisch ändert.

⁴Die Potentialbilder der Abbildungen 5.5 und 5.6 enthalten fünf bzw. in einem Fall vier Stufen, was hier berücksichtigt wird.

Probentemperatur in K	Polarität	Stromdichte j_a in A/m	Strom I_a in nA	Flächenwiderstand R_{\square} in Ω/\square	Vergleichsfaktor f
155	+	0.06	12	8333	1.1
155	–	0.03	6	13333	2.1
210	+	0.11	22	13636	1.75
210	–	0.07	14	15714	2.0
230	+	0.11	22	9091	1.5
230	–	0.1	20	10000	1.6

Tabelle 5.3.: Zusammenstellung der Auswertungsergebnisse der Rastertunnelpotentiometrieuntersuchungen an der Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Ag Oberfläche.

Ergänzend dazu sollen die manuellen Potentialmessungen bei 130 K und 300 K betrachtet werden (Abbildung 5.4). In den gezeigten Messungen ist der Kontaktspitzenabstand unterschiedlich: 130 μm bei 130 K gegenüber 335 μm bei 300 K. Zusätzlich werden wieder die damaligen Potentiometriemessungen [4] herangezogen; hier betrug der Spitzenabstand für die STP-Messungen 145 μm bei 300 K.

Im Folgenden soll herausgearbeitet werden, welchen Einfluss variierende Kontaktspitzenabstände auf die gemessene Leitfähigkeit bzw. den Widerstand der Oberfläche haben. Darüber hinaus soll diskutiert werden, ob dies eventuell der Grund für die zuvor im Rahmen der I - V -Messungen gemessenen, bei beiden Temperaturen stark unterschiedlichen Leitfähigkeiten sein können.

Gemäß Anhang A.1, Gleichung A.1, gilt für den Widerstand einer zweidimensional leitenden Schicht:

$$R_{2D,d} \propto \underbrace{2 \cdot \ln(d) - \ln(r_1) - \ln(r_2)}_C$$

Hier ist d der Abstand zwischen den Kontaktspitzen und $r_1 = r_2 = 10 \mu\text{m}$ sind die Radien der für die Kontaktierung genutzten Silberinseln. Dieser Wert wird als konstant angenommen und wurde repräsentativen SEM-Aufnahmen der Kontaktgeometrie auf der Oberfläche entnommen. Zur Vereinfachung wird der Proportionalitätsfaktor unter dem Symbol C zusammengefasst.

Berechnet man die Proportionalitäten C für die verschiedenen Abstände d folgt:

$$C_{130\mu\text{m}} \propto 5.1$$

$$C_{145\mu\text{m}} \propto 5.4$$

$$C_{335\mu\text{m}} \propto 7.0$$

Die Proportionalitätsfaktoren C variieren somit nur in einem kleinen Bereich bei Änderung des Kontaktspitzenabstands.

Darüber hinaus sollen die berechneten Widerstände aus Tabelle 5.1 betrachtet werden. R_{130K} und R_{300K} sind hier die Mittelwerte der jeweiligen Widerstandswerte je Temperatur. Daneben gestellt findet sich das Verhältnis der korrespondierenden C -Werte für die verwendeten Spitzenabstände⁵ bei den beiden Temperaturen: 130 μm bei 130 K und 335 μm bei 300 K. Die Verhältnisse sind:

⁵im Rahmen der Experimente zur manuellen Potentialbestimmung

$$\frac{R_{130K}}{R_{300K}} = \frac{2.3}{2.65} \approx 0.87$$

und

$$\frac{C_{130\mu m}}{C_{335\mu m}} = \frac{5.1}{7.0} \approx 0.73$$

Die beiden Verhältnisse sind fast gleich. Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, dass sich die lokale Leitfähigkeit der Oberfläche nicht mit der Temperatur ändert. Weder ein Unterschied der Abstände zwischen den Kontaktspitzen im gezeigten Ausmaß noch die Änderung des (berechneten) Widerstands (*exklusive* Zuleitungen und Kontaktwiderstände) bei variierender Temperatur kann dafür verantwortlich sein, dass sich die von uns bestimmte globale Leitfähigkeit der Oberfläche um Größenordnungen ändert zwischen hoher und tiefer Temperatur. Geometrische Gründe können also ausgeschlossen werden. Der Grund hierfür muss also woanders gesucht werden.

Was also verursacht die in den I-V-Messungen beobachtete, starke Variation der globalen Leitfähigkeit bei Änderung der Proben temperatur?

Erfahrungsgemäß bereitet die Kontaktierung bei tieferen Temperaturen als Raumtemperatur nicht nur bei dieser Oberfläche Probleme. Im hier verwendeten Aufbau kann nur die Probe gekühlt (oder geheizt) werden, nicht jedoch die Kontaktspitzen. Das bedeutet, dass eine Spitze, die in Kontakt zu der vergleichsweise kalten Probe gebracht wird, zunächst abkühlt und dadurch kontrahiert. Dies wiederum beeinflusst den Kontakt, da die Spitze sich quasi „aus der Probe heraus“ bewegt. Gleiches gilt im umgekehrten Sinne für das Aufheizen der Probe, wenn Probe und Kontaktspitze zuvor bei tiefen Temperaturen gehalten wurden. All dies hat Einfluss auf die Kontaktwiderstände zwischen Probe und Spitze.

Als zentrales Problem bzw. als zentrale Fehlerquelle, die diskutiert werden muss, rücken die Kontakte bzw. die diversen Kontaktwiderstände in den Fokus. Abbildung 5.9 verdeutlicht die zugrunde liegende Situation grafisch und zeigt eine schematische Darstellung der zu diskutierenden Kontaktsituation. In Teilbild 5.9a sind zwei Spitzen gezeigt, die auf der Oberfläche befindliche Silberinseln kontaktieren. Es resultiert jeweils ein Kontaktwiderstand, der hier mit $R_{K1,K2}$ bezeichnet ist. Die Silberinseln wiederum kontaktieren die Oberflächenrekonstruktion bzw. den Siliziumfestkörper (es ist nicht klar, ob sich unter der Silberinsel die $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Ag Oberflächenrekonstruktion fortsetzt oder reines Silizium unter ihr liegt), was hier auf Basis der erlangten Messergebnisse in Form

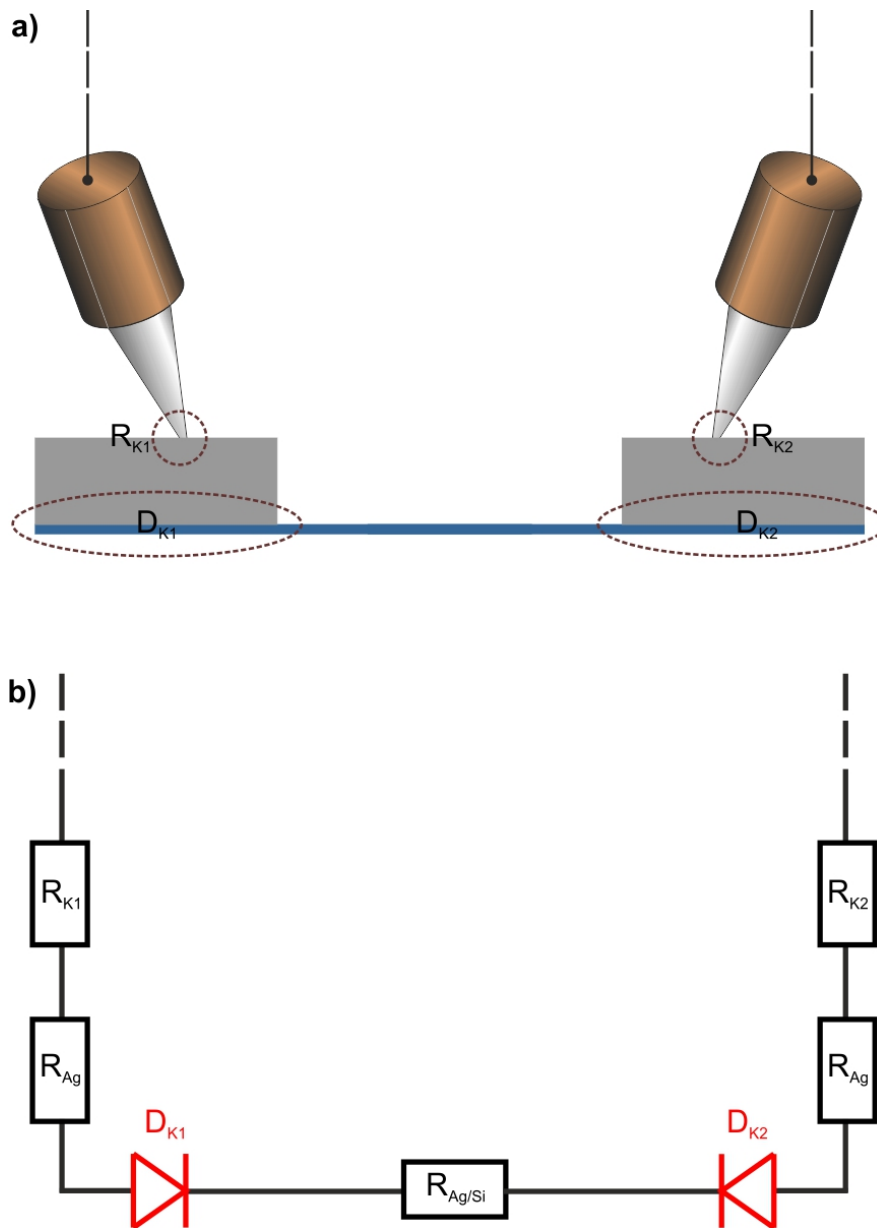


Abbildung 5.9.: a) Schematische Darstellung der Kontaktsituation bestehend aus den Kontaktspitzen, die auf der Oberflächenrekonstruktion befindliche Ag-Inseln kontaktieren. b) Ersatzschaltbild für die in a) dargestellte Situation. Es sind $R_{K1,K2}$ die Kontaktwiderstände Spitze-Insel und die Dioden $D_{K1,K2}$ beschreiben die Kopplung der Insel an die Oberflächenrekonstruktion/Festkörper. Sie sind aufgrund ihrer großen Bedeutung für das elektrische Verhalten des gesamten Systems in rot dargestellt. Weiterhin ist R_{Ag} der Widerstand der Ag-Insel und $R_{Ag/Si}$ der Widerstand der Oberflächenrekonstruktion.

zweier gegensätzlich geschalteter Dioden $D_{K1,K2}$ dargestellt ist.

Aller Wahrscheinlichkeit nach handelt es sich bei den gezeigten Dioden, die die Kopplung der Ag-Inseln zum Substrat beschreiben, um Schottky-Dioden, da es sich um eine Grenzschicht zwischen Metall und Halbleiter handelt. In Abbildung 5.4a (tiefe Temperatur) sieht man starke Potentialabfälle jeweils in der Nähe des negativ gepolten Kontakts, gekennzeichnet durch die gestrichelten Verbindungslinien. Da es sich um n-dotiertes Siliziumsubstrat handelt wird die an der negativ gepolten Kontaktspitze gelegene Diode in Sperrrichtung betrieben [134], so dass hier mehr Spannung in unmittelbarer Umgebung zur Kontaktspitze abfällt. „Hinter“ der in Sperrrichtung betriebenen Diode bestimmt dann der Widerstand der Rekonstruktion/des Halbleiters den Spannungsabfall. Bei Raumtemperatur ist der Einfluss der sperrenden Diode verglichen mit dem Widerstand der Rekonstruktion/des Halbleiters kleiner, dementsprechend fällt hier die Spannung auf der gesamten Strecke gleichmäßig ab, wie in Abbildung 5.4b zu sehen. Auch könnte das beobachtete Verhalten auf die Existenz von Bereichen der Rekonstruktion hindeuten, die um die Kontaktinseln herum lokalisiert sind und deren elektrische Kopplung an die restliche Oberflächenrekonstruktion mit Änderung der Proben temperatur variiert. Dies würde zumindest das in Abbildung 5.4a gesehene Verhalten des zunächst starken Potentialabfalls in der Nähe des Kontaktes (gestrichelte Linie) erklären.

Die Kopplung der Kontakte, seien dies die Inseln selbst oder die erwähnten Bereiche um die Inseln herum, ändert sich demnach in Abhängigkeit der Temperatur derart, dass bei sinkender Temperatur mehr Spannung an dieser Stelle abfällt und demnach weniger Spannungsdifferenz an der Oberflächenrekonstruktion anliegt; sprich der globale Widerstand größer wird. Dies würde die beobachteten Messergebnisse erklären.

Alternativ ist es auch vorstellbar, dass die Silberinseln keinen direkten Kontakt zu der Oberflächenrekonstruktion herstellen, sondern der Strom immer unter der Insel durch das Siliziumsubstrat fließt (vgl. hier das System Au/Ge in Kapitel 5.2; hier koppeln die auf der Oberfläche vorhandenen Au-Inseln elektrisch nicht an direkt daneben liegende Drahtstrukturen).

Zusammen genommen könnte dies erklären, warum die (makroskopisch) festgestellten, globalen Leitfähigkeiten bei niedrigen Temperaturen kleiner ausfallen als bei Raumtemperatur, die lokale Leitfähigkeit sich aber kaum mit der Proben temperatur ändert, wenn man die Betrachtung ohne die Kontakt(bereich)e durchführt.

Abschließend konnte mit Hilfe der Rastertunnelpotentiometrie gezeigt werden, dass sich

die lokale Leitfähigkeit der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ -Oberfläche in Abhängigkeit der Proben temperatur kaum ändert. Vielmehr sind es die Auswirkungen der sich mit der Temperatur ändernden Kontaktwiderstände, die in den gezeigten direkten Leitfähigkeitsmessungen beobachtet werden und zu der Annahme verleiten, eine drastische Leitfähigkeitsänderung zu beobachten. Die Temperaturabhängigkeit der Kontaktwiderstände führt u.a. dazu, dass die an die Oberfläche bzw. den untersuchten Bereich der Oberfläche anlegbare Spannung mit sinkender Temperatur immer kleiner wird und somit kaum messbare bis hin zu nicht vorhandene Spannungsabfälle an den Stufenkanten der Oberfläche resultieren.

Ein elektronischer Phasenübergang des 2DEG im untersuchten Temperaturbereich konnte nicht verifiziert werden.

5.2. Potentiometrie auf Ge(001)c(8 × 2)-Au

Im Rahmen dieses Kapitels wird der elektrische Transport von Elektronen in der Ge(001)c(8 × 2)-Au Oberfläche mittels STP untersucht. Wie in Kapitel 4.3 beschrieben sollten die atomaren Drähte an der Oberfläche des Systems nach *Blumenstein et al.* [6] eine ideale Möglichkeit bieten, elektrischen (eindimensionalen) Transport in Oberflächen zu untersuchen. Dieser eindimensionale elektrische Transport ist ein besonderes Merkmal dieser Drähte.

Im Vorfeld der Experimente am Nanoprobe wurden Vorarbeiten und komplementäre Messungen von *M. Wojtaszek* aus der Arbeitsgruppe von *Prof. Dr. Szymonski* von der *Jagiellonian University of Krakow, Poland* durchgeführt [135]. Dort wird ebenfalls ein 4-Spitzen-STM eingesetzt.

Abbildung 5.10a zeigt eine SEM-Aufnahme der Au/Ge-Oberfläche. Aufgenommen wurde das Bild in Krakau von *M. Wojtaszek*⁶. Gut zu erkennen sind die kristallinen Goldinseln auf der Oberfläche, die sich aus der für die Rekonstruktion nicht benötigten Menge an Gold bilden. Die Gesamtbedeckung beträgt in den vorgestellten Experimenten ca. 1.7 nm.

Im Rahmen der vorab geleisteten Arbeiten hat *M. Wojtaszek* experimentell bestimmt, wie sich der Widerstand zwischen zwei kontaktierten Goldinseln mit dem Abstand zwischen diesen beiden Inseln verhält. Es wird hier davon ausgegangen, dass über die Goldinseln die Oberfläche kontaktiert werden kann⁷. Im weiteren Verlauf dieser Diskussion wird sich zeigen, dass dies genau nicht möglich ist. Abbildung 5.10b zeigt den schematischen Aufbau hierzu: Das Mehr-Spitzen-STM kontaktiert mit zwei Spitzen zwei auf der Probe gewachsene Goldinseln. Der Widerstand wird zwischen diesen beiden Spitzen gemessen, während eine Spitze ihre Position nicht verändert und die andere durch Umsetzen den Abstand variiert. Das Resultat ist in Abbildung 5.10c gezeigt. Der elektrische Widerstand variiert im $k\Omega$ -Bereich.

Um den Verlauf des Graphen zu interpretieren, bedient man sich folgender Modellvorstellung (siehe Anhang A.1): Durch zwei kreisförmige Kontaktbereiche mit Radius $r_{1,2}$ (in diesem Fall Goldinseln auf der Oberfläche) wird ein Strom in das System injiziert (siehe Abbildung 5.10). Der Abstand zwischen den Kontakten sei d und es gelte $r_{1,2} \ll d$. Für die

⁶Das Nanoprobe-System in Krakau verfügt über ein SEM mit bis zu 1 nm Auflösung. Daraus erklärt sich, dass hier Au-Inseln (typische Größe ca. 50 nm) zu erkennen sind während das auf von uns aufgenommenen Bildern (Auflösung ca. 100 nm) nicht der Fall ist.

⁷In mehreren aktuellen Forschungsprojekten sollen über die Goldinseln die atomaren Drähte kontaktiert werden, die wiederum einzelne Moleküle an einer Stelle kontaktieren können. Auf diese Weise könnte der elektrische Transport durch nur ein einziges Molekül untersucht werden.

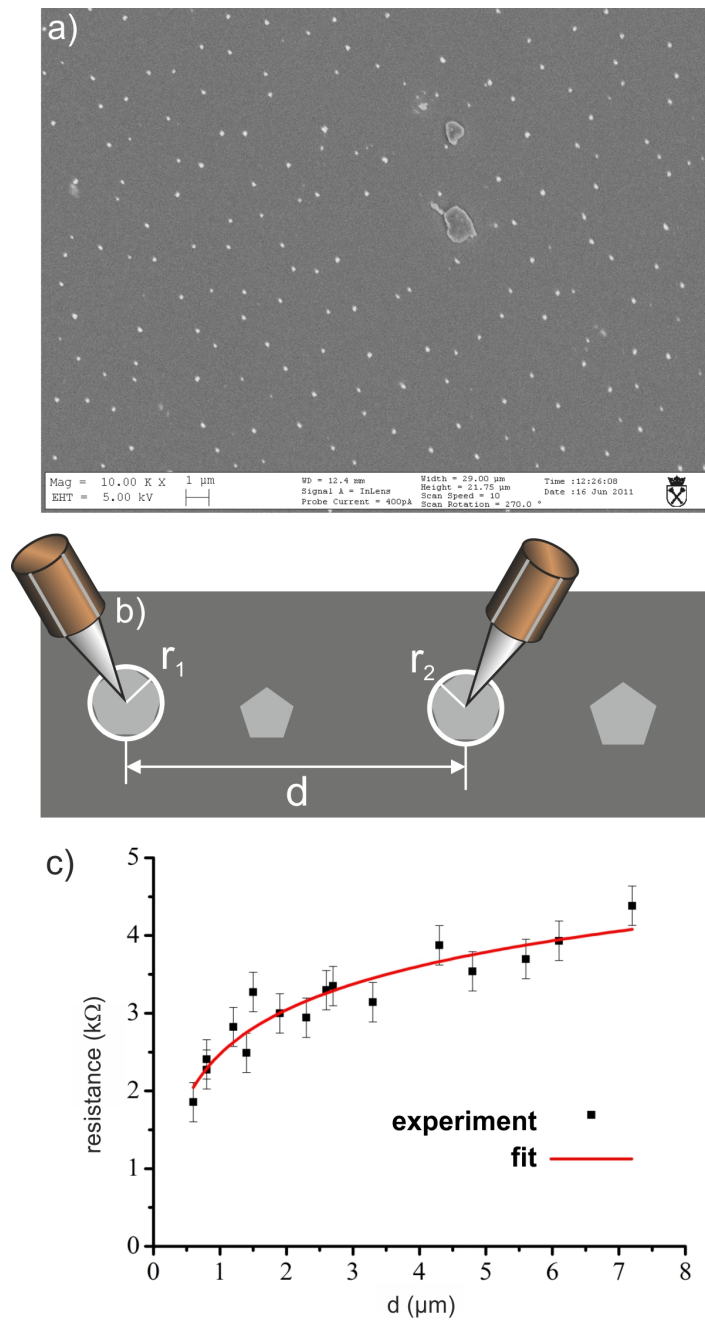


Abbildung 5.10.: a) SEM-Aufnahme einer Au/Ge(001)-Oberfläche, präpariert wie in Kapitel 4.3 beschrieben. b) Bestimmung der Abstandsabhängigkeit des elektrischen Widerstands. Schematische Skizze des Aufbaus im Mehr-Spitzen-STM. c) Auftragung des elektrischen Widerstands als Funktion des Abstands. Quelle: [136, 135].

Abstandsabhängigkeit des elektrischen Widerstands gilt im zwei- und im dreidimensionalen Fall gemäß Anhang A.1 und den Gleichungen A.1 und A.2:

$$R_{2D} \propto 2 \ln(d) - \ln(r_2) - \ln(r_1)$$

$$R_{3D} \propto -\frac{2}{d} + \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}$$

Die logarithmische Abstandsabhängigkeit des Widerstands (siehe Abbildung 5.10c) deutet auf ein zweidimensionales System hin; die Leitfähigkeit des Systems ist also auf eine zweidimensionale Schicht beschränkt, deren Dicke d_2 deutlich dünner ist als der Abstand zwischen den Kontakten d_1 (siehe Abbildung 5.11).

Das *Nanoprobe*-System der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Szymonski verfügt über ein höher

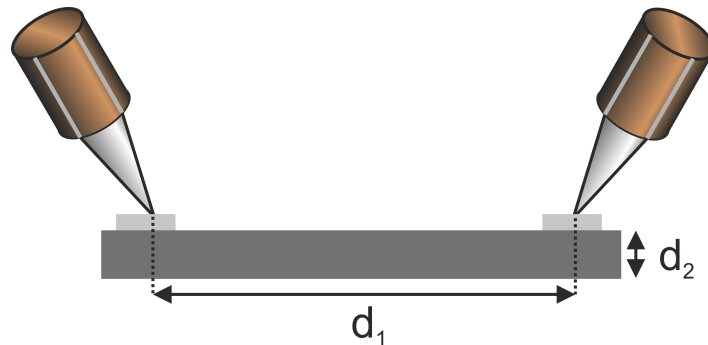


Abbildung 5.11.: Zwei Spitzen kontaktieren eine dünne Schicht der Dicke d_2 . Der Abstand zwischen ihnen beträgt d_1 und es gilt $d_1 \gg d_2$.

auflösendes SEM als das *Nanoprobe*-System in Duisburg. Daher war es dort möglich, direkt die Goldinseln auf der Oberfläche mit den Spitzen zu kontaktieren. In Duisburg kann nicht genau festgestellt werden, wo bzw. was die Spitzen kontaktieren. In diesem Stadium der Interpretation konnte aufbauend auf den Arbeiten aus Krakau davon ausgegangen werden, dass es sich um einen auf die Oberfläche beschränkten elektrischen Transport in diesem System handelt, unabhängig davon, wo die Spitzen das System kontaktieren.

Ein solches, niederdimensional leitfähiges Oberflächensystem stellt die ideale Ausgangsbasis für STP-Experimente dar. Im Rahmen einer Kooperation wurde M. Wojtaszek als Gastwissenschaftler nach Duisburg eingeladen und mit ihm zusammen das Probensystem am *Nanoprobe*-System in Duisburg untersucht. Ziel der Zusammenarbeit war es, das System Au/Ge(001) mittels STP zu untersuchen.

Abbildung 5.12a zeigt eine STM-Aufnahme der präparierten Oberfläche und den hier

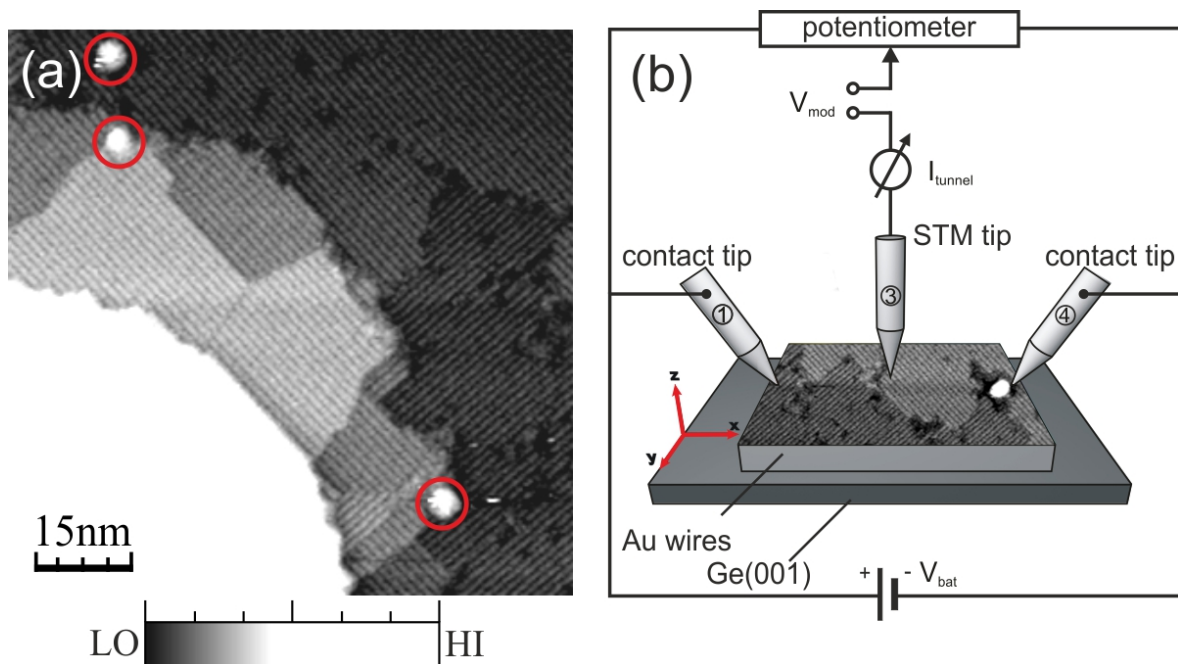


Abbildung 5.12.: a) STM-Aufnahme der atomaren Drähte innerhalb der Rekonstruktion; zu sehen sind beide Domänen; der Winkel zwischen ihnen beträgt 90°. Markiert sind nm-große Adsorbate. In der linken unteren Ecke ist eine Goldinsel zu sehen. $U_t = -1 \text{ V}$, $I_t = 30 \text{ pA}$, 130 K. b) Messaufbau zur STP: Zwei Kontaktspitzen injizieren einen lateralen Strom in die Oberfläche. Die dritte Spitze misst im Tunnelkontakt simultan die Topografie und das elektrochemische Potential.

verwendeten Messaufbau zur STP (b). Das STM-Bild zeigt in der unteren linken Ecke eine Goldinsel, also existieren auch hier kristalline Goldinseln auf der Probenoberfläche. Diese Inseln haben einen typischen Durchmesser von ca. 50 nm (unter Berücksichtigung der Mehrfachspitze). Neben der Goldinsel sieht man die atomaren Drähte. Diese liegen in zwei Domänen vor, die an Stufenkanten in einem Winkel von 90° aneinander stoßen. Die Orientierung der Drähte folgt der der beiden Substratdomänen. Zusätzlich liegen auf der Oberfläche einige nm-große Adsorbate vor.

Ähnlich der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche würden sich die Goldinseln als Kontaktstellen anbieten, um mit den Kontaktspitzen die Oberfläche nicht zu beschädigen [4]. Wie bereits beschrieben sind diese Goldinseln leider mit dem eingesetzten SEM nicht aufzulösen, so dass kontaktiert werden musste, ohne genau zu wissen ob die freie Fläche oder eine Goldinsel (wahrscheinlich immer beides) angefahren wurde. Die experimentellen Parameter, die zu der in Abbildung 5.13 gezeigten Messung gehören, sollen hier einmal

aufgelistet werden: Vor Anlegen der Querspannung wurde mit Hilfe eines Ohmmeters der Querwiderstand zu ca. $4,6\text{ k}\Omega$ bestimmt. Als Querspannung zwischen den beiden Kontaktspitzen wurde 9 V eingestellt was in einem Querstrom von ca. 3 mA resultierte. Querspannung und -strom wurden über die Zeit der Messung nahezu konstant gehalten. Die Richtung des Stroms wurde so gewählt, dass er möglichst parallel zu einer der Drahtorientierungen floss (bzw. senkrecht zu der zweiten Drahtorientierung). Die dritte Spitze hat im Tunnelabstand simultan sowohl Topografie als auch elektrochemisches Potential der Oberfläche gemessen. Als Modulationsspannung für den stabilen STP-Betrieb wurde eine sinusförmige Wechselspannung mit 4 mV Amplitude und einer Frequenz von 2 kHz gewählt.

Abbildung 5.13 zeigt die aufgenommene Topografie zusammen mit dem Potential, aufgenommen im Rahmen einer STP-Messreihe. Der Bildausschnitt zeigt mehrere Stufenkanten (inklusive Domänenwechsel) und Goldinseln. Der Verlauf und die Orientierung der atomaren Drähte ist am oberen Bildrand angedeutet. Die schnelle Rasterrichtung des STM wurde so gewählt, dass sie nahezu parallel zum lateralen Stromfluß liegt. Dies gewährleistet maximale Stabilität und Auflösung der STP über die $(8 \times 2)/(2 \times 8)$ Domänengrenzen, Stufenkanten, etc. hinweg.

Abbildung 5.13a zeigt aber auch, dass die Messreihe mit einer Mehrfachspitze durchgeführt wurde. Klar zu erkennen ist dies an den großen Goldinseln, die jeweils mehrfach abgebildet werden. Dies ist hier aber kein Nachteil, da die resultierenden Messartefakte in der Topografie gut erkannt werden können und die Potentialkarte dementsprechend interpretiert werden kann.

Abbildung 5.13b zeigt die entsprechende Karte des elektrochemischen Potentials. Der Gradient von $\mu_{ec,STP}$ ist auf den Terrassen der rekonstruierten Oberfläche deutlich zu erkennen. Die Potentialdifferenz in diesem Bild beträgt insgesamt 42 mV . Auf den Goldinseln hingegen verhält sich $\mu_{ec,STP}$ relativ konstant. An den Rändern der Insel macht das Potential einen abrupten Sprung, da das Potential der Insel an diesen Stellen nicht identisch zu dem direkt daneben liegenden Potential auf den Terrassen zu sein scheint. Direkt neben die Potentialkarte ist eine Vergrößerung gezeigt, die den Potentialverlauf um eine Goldinseln herum genauer zeigt. Hier lässt sich gut die scharfe Kante zwischen Insel und Terrasse im Potential erkennen.

Abbildung 5.13c zeigt Linienprofile von Topografie und entsprechendem elektrochemischem Potential an der in Abbildung 5.13a,b gekennzeichneten Stelle. Das elektrochemische Potential folgt auf der (8×2) rekonstruierten Terrasse einem Gradienten (ca. $20\text{ }\mu\text{V}/\text{nm}$)

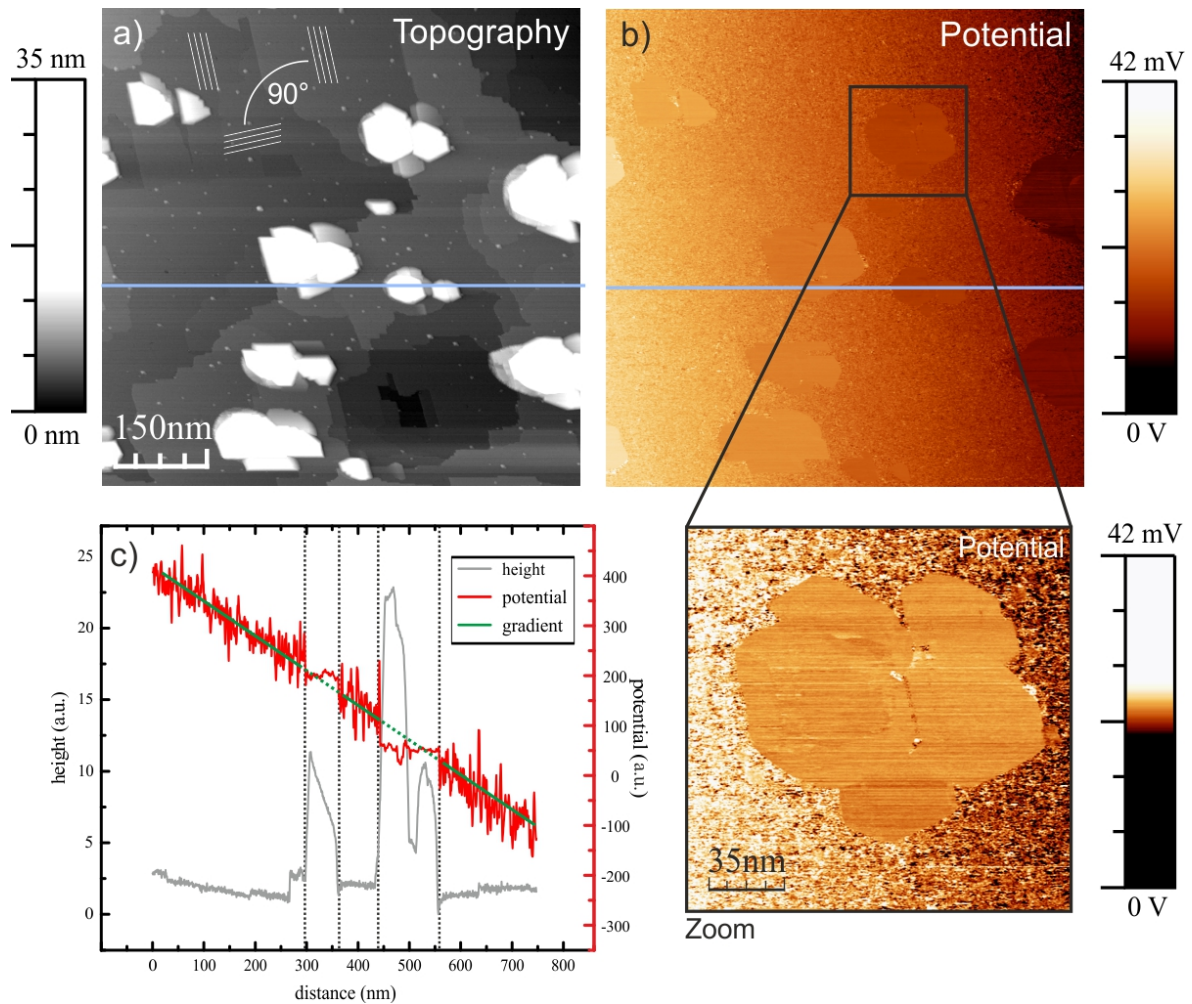


Abbildung 5.13.: a) Topografie der Ge(001)c(8 × 2)-Au Oberfläche mit b) simultan aufgenommenem elektrochemischem Potential an der Oberfläche inklusive Vergrößerung des Potentialverlaufs um eine Insel herum. Man erkennt gut die scharfe Kante zwischen dem Potential auf der Insel und dem auf der freien Fläche. c) Linienprofile von Topografie und entsprechendem elektrochemischem Potential an der in a) und b) markierten Stelle.

und weist starke Fluktuationen auf (ca. $\pm 2.5 \text{ mV}$). Es sind keine Sprünge des Potentials an Stufenkanten oder Domänengrenzen ersichtlich. Im Gegensatz zum Gradienten auf den Terrassen verhält sich das Potential auf der Goldinsel extrem ruhig und vor allem über die gesamte Inseloberfläche konstant ($\pm 1 \text{ mV}$). Trotz der Mehrfachspitzen-Artefakte kann die Grenzfläche Goldinsel-Rekonstruktion genau bestimmt und auch vermessen werden. Es zeigt sich ein abrupter Übergang von $\mu_{ec,STP}$ an der Kante der Goldinsel, d.h. ein abrupter Übergang von der linearen Steigung auf der Terrasse zum nahezu konstanten Wert von $\mu_{ec,STP}$ auf der Goldinsel. Bei genauer Betrachtung kann der Spitzenwechsel im Potentialbild anhand einer feinen Linie auf den Goldinseln ebenfalls erkannt werden. Ergänzend zeigt Abbildung 5.14 nochmals in a) die bereits bekannte Potentialkarte und in den Teilbildern b) - e) weitere Linienprofile des Potentials an unterschiedlichen Stellen, die in a) markiert sind.

Um den Potentialverlauf und vor allem das Verhalten von $\mu_{ec,STP}$ beim (abrupten) Übergang an den Inselkanten besser zu verstehen und interpretieren zu können, wurden Finite-Elemente-Simulationen mit Hilfe der Software *Comsol Multiphysics* [137] durchgeführt. Abbildung 5.15a zeigt eine solche Simulation des Potentialverlaufs anhand eines Modellsystems. Gezeigt ist eine idealisierte Probe in Form eines Quaders mit definierten Kanten und einer festgelegten, elektrischen Leitfähigkeit. Die vordere Stirnfläche hat Erdpotential (blau), die hintere liegt auf 40 mV (rot). Alle übrigen Kanten sind elektrisch isolierend angenommen. Es resultiert ein Potentialverlauf über die gesamte Probe, der durch die Farbskala wiedergegeben wird. Sie reicht den Ausgangsparametern gemäß von 0 V bis auf 40 mV . Der simulierte Potentialverlauf spiegelt den Verlauf des Potentials auf der Au/Ge(001) Oberfläche ohne Goldinseln wieder. Eine Goldinsel wird im Rahmen der Simulation durch einen weiteren Quader realisiert, der mit der eigentlichen Probe durch eine leitende Verbindungslinie verbunden ist. Diese Verbindung führt dazu, dass sich das elektrische Potential des oberen Quaders genau dem Potential der Stelle des Substrats anpasst, an der die leitende Verbindungslinie das Substrat berührt.

Abbildung 5.15b zeigt Linienprofile des Potentials an der Oberfläche, gewonnen aus den Simulationsdaten. In grau ist der ursprünglich erwartete Verlauf des Potentials gezeigt. Dieser Verlauf wird für den Fall erwartet, dass die Goldinseln die atomaren Drähte elektrisch kontaktieren. Der gefundene (rote) Potentialverlauf an der Oberfläche deckt sich mit dem in der Messung beobachteten. Die Goldinseln sind über einen leitenden Kontakt mit dem Substrat verbunden und beziehen von dort ihr elektrisches Potential. Auf den Goldinseln ist das elektrische Potential nahezu konstant. An den Kanten können Potentialsprünge

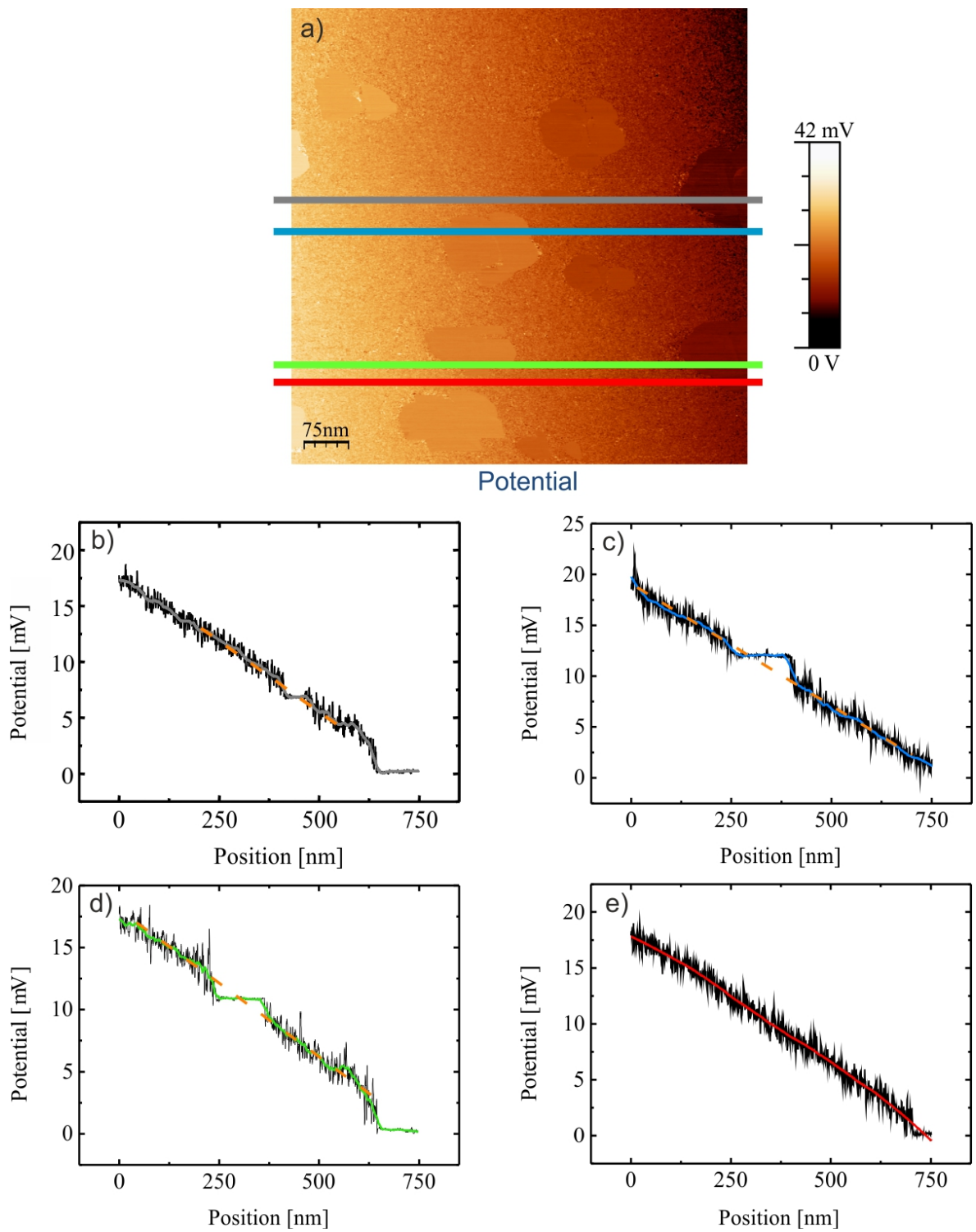


Abbildung 5.14.: a) Gleiche Potentialkarte wie in Abbildung 5.13b, aufgenommen im STP-Modus bei 300 K. Farblich markiert sind die Stellen der Linienprofile, die in b) - e) dargestellt sind.

beobachtet werden. Somit weisen die Goldinseln immer ein elektrisches Potential auf, das in einem Bereich unter ihnen, an einer definierten Stelle abgegriffen, vorliegt. Der Potentialgradient verläuft auf der freien Probenoberfläche monoton.

Das konstante Potential der Goldinseln führt dazu, dass am Rand einer Goldinsel ein abrupter Übergang hin zum Potentialgradienten der freien Fläche erfolgt. Beim Übergang von der Insel auf die freie Fläche auf der gegenüberliegenden Inselseite erfolgt abermals ein abrupter Übergang, gefolgt vom weiterhin monoton verlaufenden Potentialverlauf.

Abbildung 5.15c zeigt verschiedene Positionen eines Kontakts, der Goldinsel und Substrat verbindet. Liegt diese leitende Verbindung zwischen Goldinsel und Substrat (idealerweise) exakt mittig unterhalb der Insel, sind die Potentialsprünge an den beiden Kanten der Insel gleich groß und abrupt. In den beiden Extremfällen, in denen die leitende Verbindung an einer der Inselränder liegt, ist der korrespondierende Übergang nahezu fließend und der Sprung auf der gegenüberliegenden Seite entsprechend maximal. Im Experiment findet man meist Goldinseln, die an einer beliebigen Stelle kontaktiert sind und demnach auf beiden Seiten unterschiedlich ausgeprägte Sprünge des Potentials zeigen. Nach diesem Prinzip können durch die beliebige Positionierung der leitenden Verbindung die Potentialsprünge und ihr Verhältnis zueinander an den Inselkanten eingestellt werden. Auf diese Weise können die unterschiedlichen Verläufe der Linienprofile beim Übergang über eine Goldinsel in Abbildung 5.14 erklärt werden.

Abbildung 5.15d zeigt in der oberen Bildhälfte das der Interpretation zugrunde liegende Modell: Das Germaniumsubstrat, dargestellt durch in Reihe geschaltete Widerstände, ist durch einen elektrisch leitenden Kontakt an die Goldinseln gekoppelt. Die Position des Kontakts unter jeder Insel kann, wie oben beschrieben, variieren. Das Messsignal zeigt den Potentialverlauf über zwei verschiedene Goldinseln hinweg. Die linke Insel ist relativ weit links kontaktiert; das Potential springt am linken Rand der Insel weniger als am rechten. Der umgekehrte Fall lässt sich bei der rechten Insel beobachten; hier springt das Potential stärker an der linken Kante. Die idealisierten Daten (schwarz) geben genau das zuvor beschriebene Verhalten wieder und gleichen qualitativ dem Messsignal (rot).

Das Potential springt wie gezeigt an den Inselkanten. Diese Tatsache legt nahe, dass die atomaren Drähte elektrisch nicht an die Inseln gekoppelt sind und damit über die Inseln auch kein Strom in die Drähte injiziert werden kann. Wäre ein leitender Kontakt zwischen atomaren Drähten und Goldinseln vorhanden, dürfte das Potential beim Übergang nicht springen, sondern müsste sich langsam angleichen (siehe Abbildung 5.15b). Damit kann geschlussfolgert werden, dass eine Untersuchung der Leitfähigkeit der atomaren

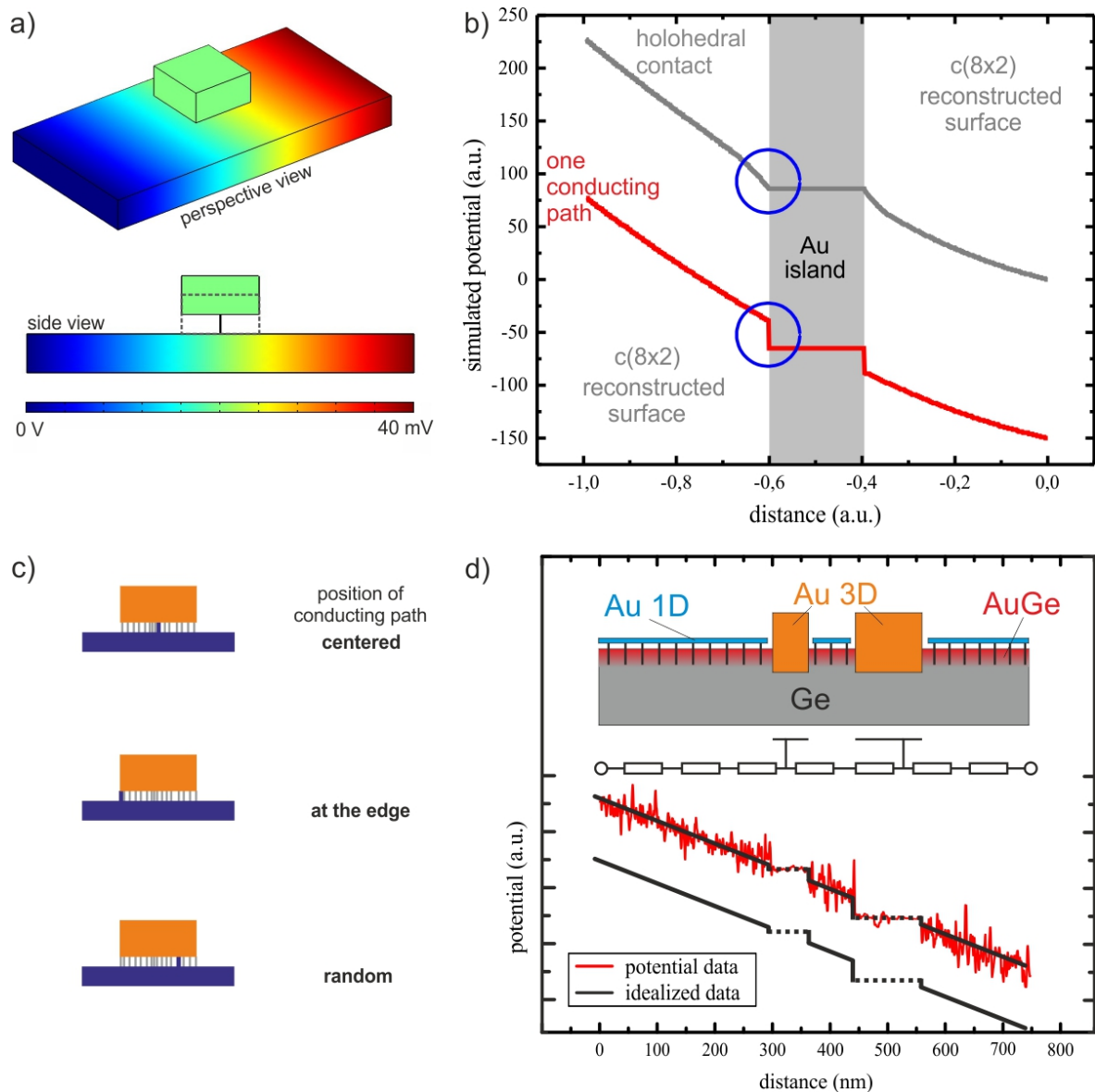


Abbildung 5.15.: a) Finite-Element-Simulation der Au/Ge(001)-Probe mit leitend verbundener, idealisierter Goldinsel. Die Farbskala gibt den Potentialverlauf wieder und läuft von 0 V ... 40 mV, in perspektivischer und Seitenansicht. b) Linienprofile über das Simulationsergebnis für (grau) den Potentialverlauf bei vollflächigem Kontakt zwischen Au Insel und Au/Ge-System und (rot) den Potentialverlauf mit Sprung an den Kanten der Goldinsel bei Kontakt über einen leitenden Pfad zum Au/Ge-System. Der (rote) Verlauf steht in guter Übereinstimmung mit den gemessenen Daten. c) Illustration der verschiedenen Positionierungsmöglichkeiten der leitenden Verbindung zwischen Au/Ge-Substrat und Goldinsel. d) Modell der Au/Ge-Probe mit Goldinseln, darunter gemessener und idealisierter Potentialverlauf.

Drähte mittels STP nicht durchgeführt werden kann, da der Querstrom nicht über eine Kontaktierung der Goldinseln in die Drähte eingebracht werden kann. Sehr wohl scheinen die Goldinseln aber mit einer leitenden, vergrabenen Schicht verbunden zu sein.

Die Ergebnisse der Rastertunnelpotentiometrie müssen dahin gehend interpretiert werden, dass nicht das Potential der eigentlichen Oberfläche vermessen wird, sondern das einer leitfähigen, darunter liegenden Schicht. Es ist bekannt, dass Gold leicht in das Germaniumsubstrat segregiert (vergleiche Kapitel 4.3). Das würde das Vorhandensein einer vergrabenen Schicht, bestehend aus Gold und Germanium, unter der Oberfläche begünstigen. Kombiniert mit den Resultaten von *M. Wojtaszek* bezüglich der Zweidimensionalität des elektrischen Transports in diesem System kann gefolgert werden, dass vermutlich diese vergrabene Schicht über die Goldinseln kontaktiert wurde und die gemessene zweidimensionale Leitfähigkeit aufweist.

Neueste Transmissionselektronenmikroskopie-Aufnahmen (TEM) aus der Arbeitsgruppe von *Prof. Dr. Szymonski* deuten stark darauf hin, dass die vermutete, vergrabene Au-Schicht unter der Oberfläche existiert. Abbildung 5.16 zeigt eine solche Aufnahme. Die Germanium-Gold-Probe ist im Querschnitt gezeigt. Der helle, mit *sm* markierte Bereich über der eigentlichen Probe resultiert aus einer Schicht, die aufgebracht wurde, um die Probe bei den Vorbereitungen für die TEM-Untersuchungen zu schützen. Die Goldinsel in der Mitte des Bildes ist klar zu erkennen (dunkler Kontrast). Auffällig ist, dass die Goldinsel sich in das Germaniumsubstrat gegraben hat. Das bestätigt die Aussage aus Kapitel 4.3, dass das aufgebrachte Gold leicht in das Germanium eindringen kann. Die oberste Lage der Probe repräsentiert die atomaren Drähte. Ca. 2 nm unter dieser Lage ist eine deutlich sichtbare, dunkel erscheinende Schicht zu sehen. Aktuelle EDX-Messungen (engl. energy dispersive X-ray spectroscopy, energiedispersive Röntgenspektroskopie) zeigen, dass diese Schicht aus Gold besteht.

Leider können keine qualitativen Aussagen über die Leitfähigkeitseigenschaften der atomaren Drähte getroffen werden, da in diese kein Strom gezielt injiziert werden konnte. Der gemessene Potentialverlauf spiegelt vielmehr den eines gekoppelten Systems wieder, bestehend aus den atomaren Drähten an der Oberfläche und der vergrabenen Goldschicht. Sowohl die Drähte als auch die Goldinseln scheinen leitend mit dieser vergrabenen, zweidimensional leitfähigen Schicht verbunden zu sein.

Die vorgestellten Untersuchungen an diesem System sollten als Vorarbeit dazu dienen, in Zukunft den elektrischen Transport durch einzelne Moleküle zu untersuchen. Hierzu sollten die Goldinseln an der Oberfläche des Systems kontaktiert werden, um anschließend

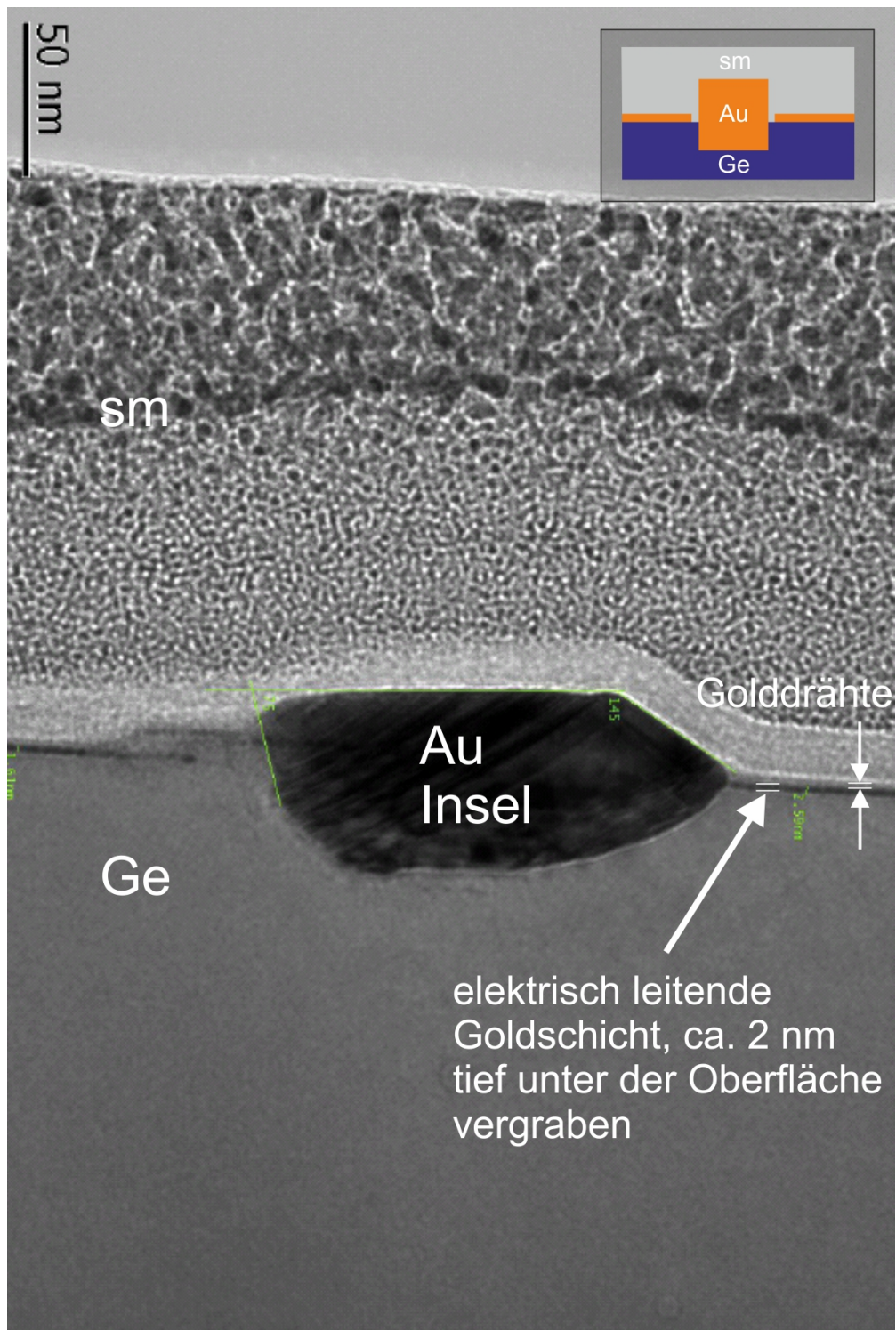


Abbildung 5.16.: Messdaten von [138]: TEM-Aufnahme einer Au/Ge-Probe (im Schnitt), wie sie auch im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurden. *sm* steht für *supporting material*, das aufgebracht wurde, um die Probe bei der Vorbereitung für das TEM nicht zu zerstören.

gezielt über die atomaren Drähte einzelne Moleküle zu kontaktieren. Als Fazit der hier vorgestellten Arbeiten kann allerdings ausgeschlossen werden, dass über die Goldinseln die atomaren Drähte elektrisch kontaktiert werden können. Somit ist es nicht möglich, auf diese Weise den Transport durch einzelne Moleküle zu untersuchen. Dazu bietet das vorliegende System nicht die erforderlichen Voraussetzungen.

6. Elektromigration (Ergebnisse und Diskussion)

6.1. Strominduzierte Oberflächendiffusion auf einem einkristallinen Ag-Nanodraht

Die in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse wurden in der Zeitschrift *Nanotechnology* veröffentlicht [102]. Ein *Video* bestehend aus den unten ausgewerteten STM-Rohdaten liegt dieser Kopie der Dissertation zum besseren Verständnis bei.

Die Ausgangssituation für das hier vorgestellte Experiment ist in Abbildung 6.1a gezeigt: Zwei W-Spitzen des STM kontaktieren einen auf Si(001) gewachsenen Ag-Nanodraht (vergleiche Kapitel 4.4). Ziel des Experiments ist es, kleinste morphologische Änderungen, die der durch den Nanodraht fließende Strom hervorruft, mit Hilfe des STM zu beobachten.

Der Kontakt der ersten Spitze (I) wird folgendermaßen hergestellt: Zwischen Probe und Spitze wird eine Spannung angelegt. Sobald beide in Kontakt kommen misst ein IVC, der an der Spitze angeschlossen ist, einen Strom. Für die Kontaktierung mit der zweiten Spitze (II) wird die nötige elektrische Spannung zwischen der ersten und der zweiten Kontaktspitze angelegt. Sobald die zweite Kontaktspitze den Nanodraht berührt, fließt auch hier ein Strom. Der gemessene Querstrom I_c gibt direkt Aufschluss über die Kontakte und ob der Nanodraht und nicht das Siliziumsubstrat kontaktiert wurde. Beide Kontaktbereiche können anschließend mittels SEM auf verursachte Schäden kontrolliert werden.

Die dritte Spitze des STM (III), die eigentliche Tunnelspitze, wird zwischen den beiden Kontaktspitzen über dem Draht positioniert (siehe Abbildung 6.1a). Die Spannung $U_c = 0.3\text{ V}$ wird zwischen den beiden Kontaktspitzen angelegt und erzeugt einen Strom $I_c = 10\text{ mA}$ durch den Ag-Nanodraht. Zusätzlich wird die Tunnelspitze gegenüber einer Kontaktspitze auf ein Potential $U_t = 2.0\text{ V}$ gelegt, das als Tunnelspannung dient. Abbildung 6.1b zeigt die Topografie des Ag-Nanodrahts in pseudo-dreidimensionaler Darstellung.

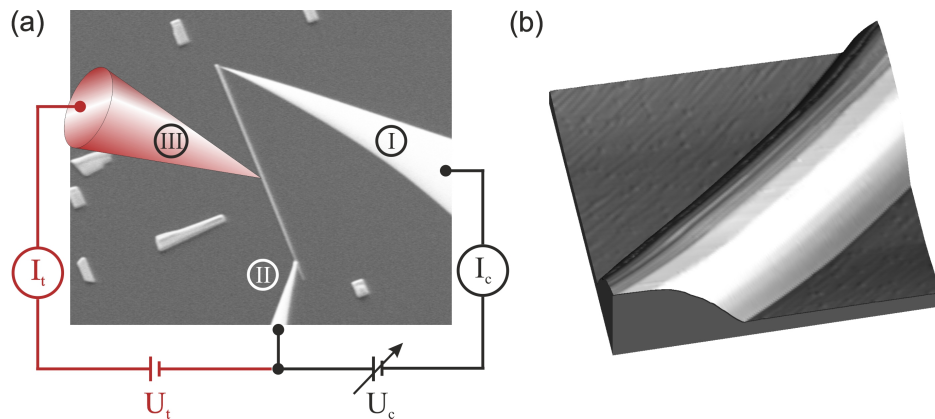


Abbildung 6.1.: a) Schematische Illustration der STM-EM-Messung mit Hilfe eines Mehrspitzen-STM. Die beiden Kontaktspitzen (I, II) kontaktieren den Ag-Nanodraht. Der Strom I_c fließt durch den Nanodraht, erzeugt durch die Spannung U_c . Die Tunnelspitze (III) misst die Topografie des Nanodrahts im STM-Modus während der elektrischen Strombelastung. SEM-Bildgröße $100 \times 80 \mu\text{m}^2$. b) Dreidimensionale Darstellung des Ag-Nanodrahts aufgenommen mit dem STM ($1.3 \times 1.3 \mu\text{m}^2$), $I_t = 25 \text{ pA}$, $U_t = 2.0 \text{ V}$. Veröffentlicht in [102].

Aus Linienprofilen kann der Querschnitt des Nanodrahts zu $0.069 \pm 0.005 \mu\text{m}^2$ bestimmt werden. Dies steht in guter Übereinstimmung mit Querschnitten aus der Literatur [92]. Die Stromdichte im Draht beträgt während des EM-Experiments $1.5 \times 10^7 \text{ A cm}^{-2}$.

Abbildung 6.2 zeigt sechs Einzelbilder der gesamten Messreihe, die aus insgesamt 74 Bildern besteht. Die gesamte Laufzeit des Experiments betrug 18 h und 30 min . Jedes Einzelbild benötigte 15 min Messzeit. Die Bilder wurden abwechselnd mit der langsamen Scanrichtung von oben nach unten und von unten nach oben aufgenommen, um Messartefakte ausschließen bzw. eliminieren zu können [11]. Die Orientierung der schnellen Rasterrichtung wurde senkrecht zu der erwarteten Materialdiffusionsrichtung gewählt, um einen etwaigen Einfluss der Tunnelspitze auf das diffundierende Material zu minimieren. Die sechs gewählten Bilder in Abbildung 6.2 repräsentieren die Topografie des Nanodrahts zu unterschiedlichen Zeiten und zeigen einen kleinen Bereich der Größe $135 \times 135 \text{ nm}^2$ der Oberfläche. Die Pfeile in den Abbildungen 6.2a und e geben die jeweils aktuelle Elektronenbewegungsrichtung an.

Quadratisch geformte Inseln zeigen die (001)-Orientierung der einkristallinen Ag-Drahtoberfläche. Zwei Stufenkanten, eine Einfach- und eine Doppelstufenkante (markiert in Abbildung 6.2a), erlauben es, den sichtbaren Teil der Oberfläche grob in drei Bereiche

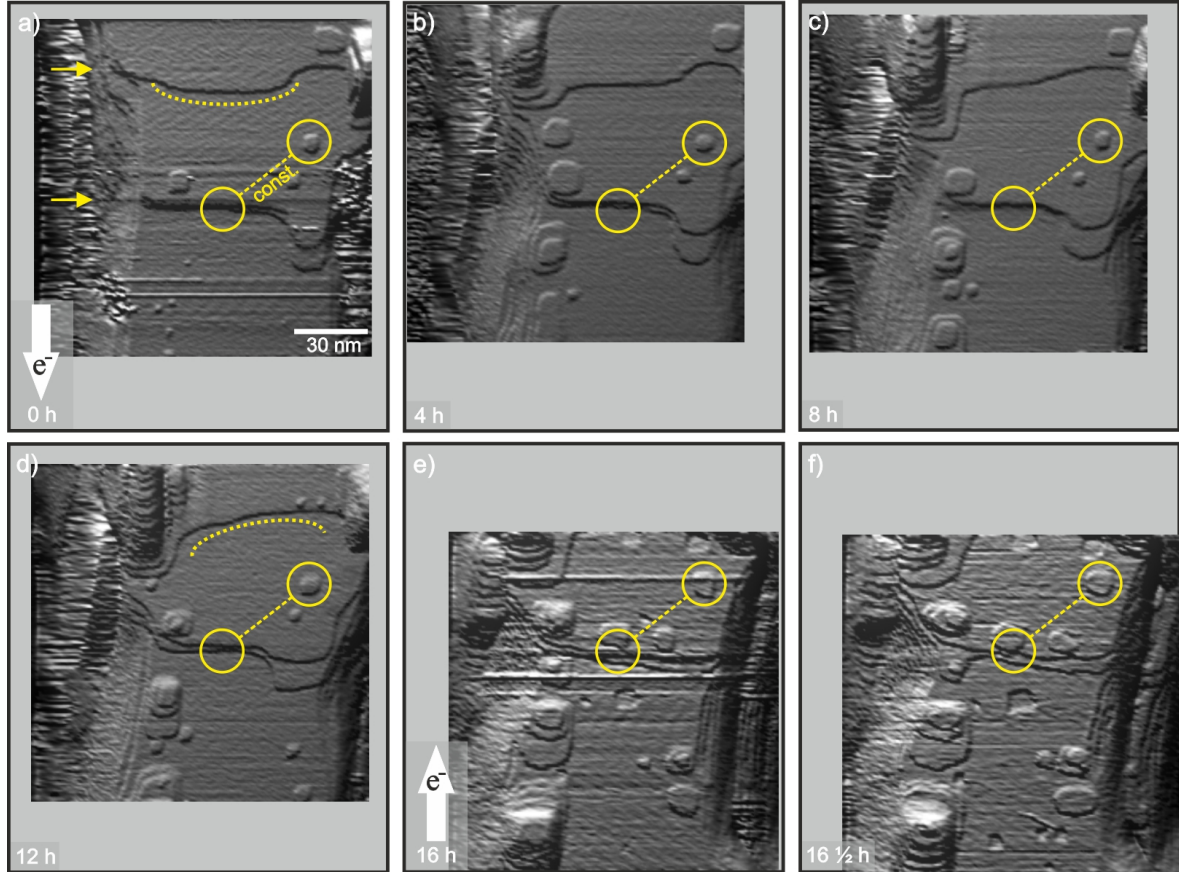


Abbildung 6.2.: a)-f) Sechs Bilder der Ag-Drahtoberfläche, die zu unterschiedlichen Zeiten mit dem STM aufgenommen wurden. Die gesamte Messreihe besteht aus 74 Einzelbildern. Das markierte Fenster zeigt in jedem Bild die gleiche Flächen- gröÙe und ist auf einen Marker zentriert. Die Kreise markieren eine Insel und eine Doppelstufenkante, die als Referenzpunkte zur Diffusionsbestim- mung dienen. Die Positionen dieser Merkmale und ihr Abstand zueinander sind über die Zeit konstant. Die gelben Pfeile in a) markieren die beiden Stufenkanten. Die weißen Pfeile in a) und e) geben die aktuell vorherr- schende Stromrichtung (Elektronenrichtung) an. Die schnelle Rasterrich- tung wurde senkrecht zur erwarteten, strominduzierten Materialdiffusion gewählt um Messartefakte zu vermeiden [11]. BildgröÙe je $135 \times 135 \text{ nm}^2$, $I_t = 25 \text{ pA}$, $U_t = 2.0 \text{ V}$, Querstrom durch den Nanodraht $I_c = 10.1 \text{ mA}$ bei $U_c = 0.3 \text{ V}$, Stromdichte $1.5 \times 10^7 \text{ A cm}^{-2}$. Gesamtzeit aller Messun- gen: 18 h und 30 min .

aufzuteilen. Ziel ist es, dass bei Anlegen der elektrischen Spannung diese Stufenkanten, Inseln, etc. durch getriebene Bewegung mobil werden und diese Bewegungen auf der Oberfläche ausgewertet werden können.

Um möglichst genaue Angaben über Diffusionspfade, -richtungen und -geschwindigkeiten machen zu können, wurden Referenzpunkte in der Oberfläche gewählt, deren Positionen über die Zeit konstant zu sein scheinen. Auf diese Weise können relative Positionen und Geschwindigkeiten bestimmt werden. Der eine Referenzpunkt ist eine Insel oben rechts im Bildausschnitt, die andere Referenz ist der Abstand dieser Insel zum Zentrum der Doppelstufe. Beide sind durch Kreise in Abbildung 6.2a hervorgehoben. Die Fixierung der Position könnte durch ein Adsorbat oder einen Defekt hervorgerufen werden. Abschließend konnte dies nicht genau geklärt werden.

Die thermische Drift des gesamten Experiments wurde zu $\approx 1.7 \text{ nm/h}$ bestimmt und bei den Angaben zu Position und Geschwindigkeit bereits berücksichtigt bzw. eingerechnet. Alle Bewegungsrichtungen und Geschwindigkeiten wurden relativ zu den Referenzpunkten bestimmt.

Da der Stromfluss immer auch Leistung im System deponiert und Joulsche Wärme verursacht, die wiederum thermische Drift der Probe erzeugt, mussten moderate Bedingungen gewählt werden: $I_c = 10 \text{ mA}$ bei $U_c = 0.3 \text{ V}$. Besonders wichtig ist es, Bewegungen zu unterscheiden, die durch die Joulsche Wärme hervorgerufen werden und nicht EM-basiert sind. Um dies zu gewährleisten wurde während der Messung die Stromrichtung invertiert. Wird die Stromrichtung invertiert und die Stromdichte dabei konstant gehalten wird Materialtransport aufgrund von Elektromigration auch instantan die Richtung umkehren. Wohingegen der Materialtransport resultierend aus der Joulschen Wärme die Richtung beibehält. Die Invertierung der Stromrichtung wurde nach 14 h und 30 min durchgeführt (siehe Abbildung 6.2e).

Abbildung 6.2b zeigt die Oberfläche des Nanodrahts nach vier Stunden Messzeit. Die Struktur der Oberfläche hat sich geändert, unter anderem haben sich mehrlagige Inseln auf den Terrassen gebildet. Mit fortschreitender Messzeit hat sich die Form der oberen Stufenkante geändert: war sie zu Beginn der Messung nach „unten“ gebogen (vgl. Abbildung 6.2a), erscheint sie jetzt in die entgegengesetzte Richtung gebogen (vgl. Abbildung 6.2d). Die äußeren Punkte der Stufenkanten scheinen durch eine Art „pinning“ ihre Position mit fortschreitender Zeit nicht zu ändern. Die Stufenkante wird so immer mehr entgegen der Stromrichtung gebogen. Dies erklärt sich aus einem Materialtransport weg von der Stufenkante in Richtung des Elektronenflusses. An der Stufenkante wird Material

abgetragen, das auf die freie Terrasse darunter gelangen kann (vgl. Abbildung 6.4). Das legt nahe, dass die hier beobachtbare Elektromigration durch Elektronenstöße mit den Atomrümpfen des Nanodrahts und einer einhergehenden Impulsübergabe dominiert wird. Die Windkraft ist demnach in diesem System die maßgebliche und treibende Kraft der Elektromigration.

Im Laufe der weiteren Messung bildet sich auf der linken Seite des Bildausschnitts auf der oberen Terrasse eine hügelartige Struktur aus. Darüber hinaus bilden sich mehrere rechtwinklige Löcher im unteren Bereich aus. Betrachtet man die zentrale Doppelstufe genauer, fällt auf, dass sich auch ihre Form ändert; nicht jedoch die Position. Die Krümmung der Doppelstufenkante ist jetzt deutlich mehr nach oben gebogen, ähnlich der Einzelstufenkante. Die beiden anhängenden „Terrassenausläufer“ (rechte Seite) werden immer kleiner. Das hier abgetragene Material bewegt sich weg von der Kante in Richtung der freien Terrasse (siehe Abbildungen 6.2c,d). Die Gesamtzahl von Inseln und Löchern auf dem sichtbaren Teil der Nanodrahtoberfläche nimmt mit fortschreitender Zeit zu und damit erhöht sich auch die Rauigkeit der Oberfläche. Diese kleinen Inseln und Löcher sind eine Lage hoch bzw. tief.

Im Folgenden werden genau solche Löcher genauer untersucht. Dies ist sinnvoll, da der Ausfall elektronischer Schaltkreise ein Resultat von abwanderndem Material, dass Poren bzw. Löcher hinterlässt und so die Stromleitung hindert oder gar unterbricht, ist. Somit ist es nahe liegend, kleinste Löcher in der Oberfläche zu analysieren, da sie die elementaren Ausgangspunkte für einen späteren Ausfall einer makroskopischen Leiterbahn darstellen.

Abbildung 6.3d und h zeigen die Positionen für vier verschiedene Löcher als Funktion der Zeit für beide Stromrichtungen. Auch hier wird die aktuelle Stromrichtung durch einen Pfeil symbolisiert. Die Löcher werden für die Stromrichtung „oben → unten“ in Abbildung 6.3a mit den Nummern 1 und 2 bezeichnet, die beiden anderen Löcher für die invertierte Stromrichtung „unten → oben“ mit 3 und 4 (siehe Abbildung 6.3e). Für die Stromrichtung „oben → unten“ zeigen ausgewählte STM-Bilder (Abbildung 6.3a-c) die Oberfläche zu drei verschiedenen Zeiten während der Messung. Die Löcher 1 und 2 bewegen sich auf die atomare Stufenkante im Zentrum des Bildes zu. Dies geschieht gegen die Stromrichtung und damit gegen die Richtung der Elektronen. Loch 2 verschwindet später in der Stufenkante. Nach Änderung der Polarität des Querstroms I_c und damit Umkehr der Elektronenbewegungsrichtung sind zwei andere Löcher in der Oberfläche sichtbar: 3 und 4 (Abbildung 6.3e). Im Laufe der Zeit laufen beide Löcher auf die obere Referenzinsel zu, bewegen sich also im Bild nach unten. Damit ist die Bewegungsrichtung

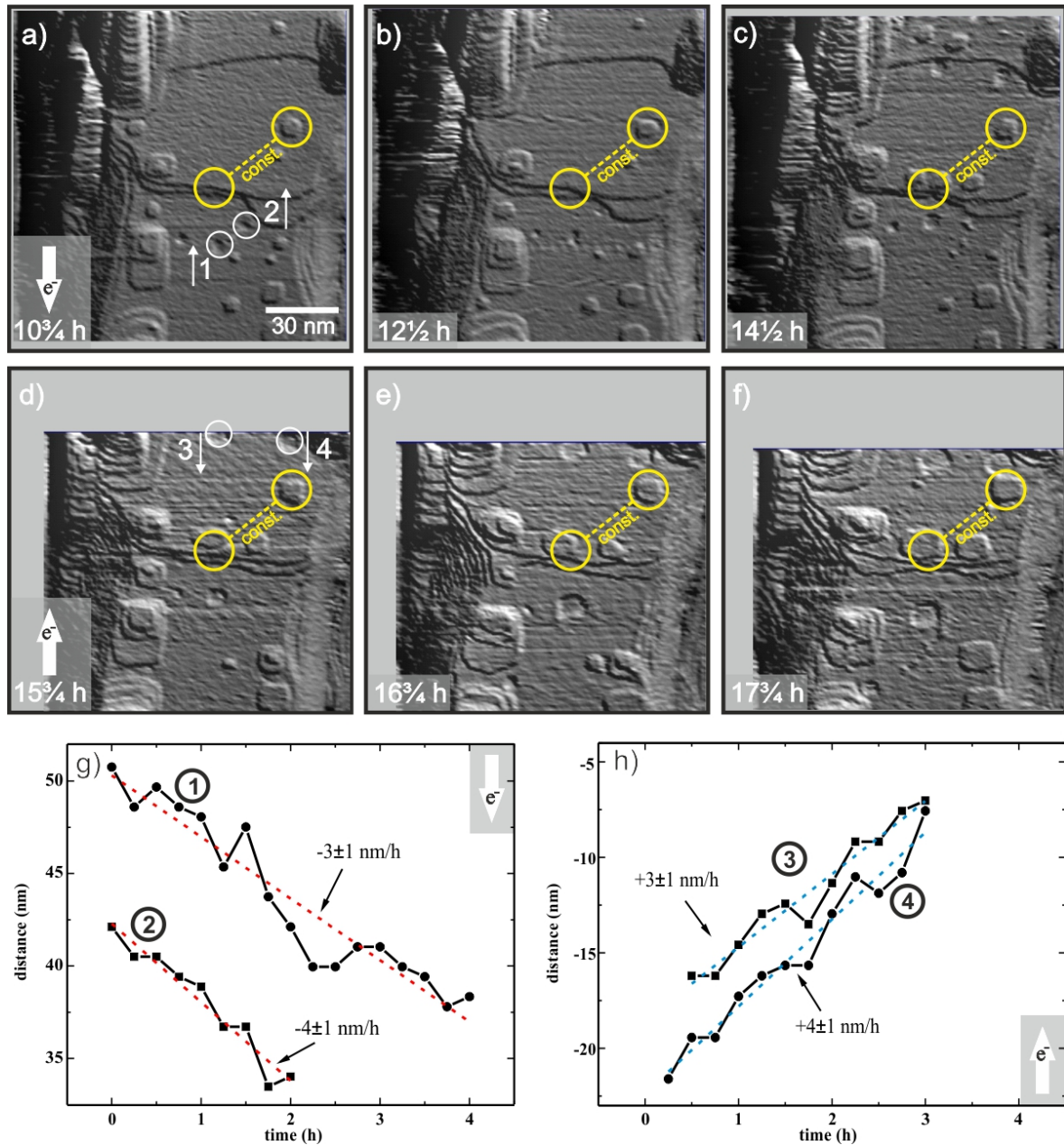


Abbildung 6.3.: Einzelbilder der STM-EM-Bilderserie. Gezeigt ist der Bewegungsverlauf der Löcher 1 und 2 (3 und 4) in der Oberfläche im Verlauf der Zeit für die Stromrichtung „oben → unten“ (a-c) und „unten → oben“ (d-f). Die jeweils aktuelle Stromrichtung wird durch die Pfeile symbolisiert. Nach 14 h und 30 min wurde die Stromrichtung umgekehrt. Die Graphen in g) und h) zeigen die Position der Löcher in der Oberfläche als Funktion der Zeit und machen deutlich, dass die Bewegungsrichtung bei Umpolung umkehrt. Für beide Stromrichtungen werden die Diffusionsgeschwindigkeiten zu 3...4 nm/h bestimmt. Veröffentlicht in [102].

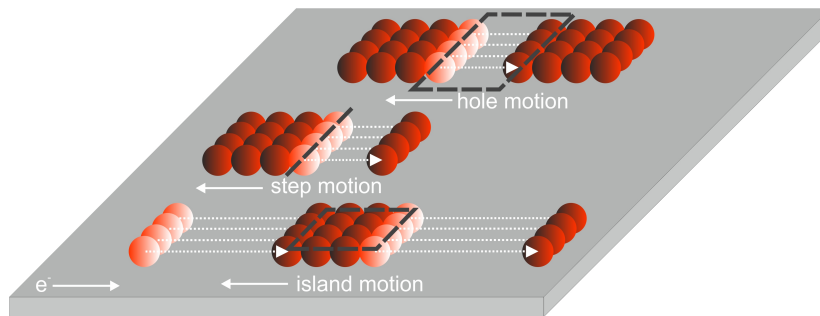


Abbildung 6.4.: Schematische Darstellung des Diffusionsmodells *i.* im Falle eines Windkraft-dominierten Elektromigrationsprozess für alle in der Messreihe vorkommenden Oberflächenfeatures, basierend auf Anlagerungs-/Abtrennungs-Mechanismen. Jedes Oberflächenfeature bewegt sich entgegen der Stromrichtung/Richtung der einlaufenden Elektronen. Der Materialtransport findet in Richtung des Elektronenflusses statt. Veröffentlicht in [102].

wieder gegen die der Elektronen gerichtet. Prozesse, verursacht einzig durch Joulsche Wärme, können somit ausgeschlossen werden und die beobachtete Bewegung kann Elektromigrationsprozessen zugeschrieben werden. Für beide Stromrichtungen bewegen sich die Löcher entgegen der Stromrichtung und damit bewegt sich das Material mit den Elektronen in die gleiche Richtung (siehe Abbildung 6.4).

Die Bewegung von Löchern in einer Oberfläche ist einfacher zu untersuchen als die von Stufenkanten oder Inseln auf der Oberfläche, da es sich hier um ein fast geschlossenes System handelt. Stufenkanten und Inseln dagegen werden zusätzlich durch die Eigenschaften benachbarter Stufenkanten und Inseln beeinflusst wie zum Beispiel Abstand zueinander oder Form. Innerhalb eines solchen Loches in der Oberfläche bewegt sich das Material von einer bestimmten Seite zu einer anderen.

Die Positionen der Löcher 1 und 2 (Abbildung 6.3a) und 3 und 4 (Abbildung 6.3e) wurden relativ zu den Positionen der Referenzpunkte bestimmt. Daraus können dann die Bewegungsgeschwindigkeiten bestimmt werden (Abbildung 6.3d und h). Die Diffusionsgeschwindigkeiten der Löcher in der Oberfläche wurden für beide Stromrichtungen zu $3 \dots 4 \text{ nm/h}$ bestimmt. Wird die Stromrichtung invertiert, wird auch die Diffusionsrichtung umgekehrt. Es existieren zwei mögliche Diffusionsmodelle, beide wurden 2010 von *Tao et al.* beschrieben [139]:

i. Wie in Abbildung 6.4 gezeigt basiert das erste Diffusionsmodell auf atomaren Anlagerungs- und Abtrennungs-Mechanismen. Abbildung 6.4 zeigt diese unter dem Einfluss einer dominierenden Windkraft. Dargestellt sind die Mechanismen für Stufenkanten, Löcher

und Inseln. Die Kernaussage ist: um ein Oberflächenfeature von (im Bild) rechts nach links zu bewegen muss der Materialtransport nach rechts gerichtet sein; entgegen der Bewegung des Oberflächenfeatures.

ii. Das zweite Modell beinhaltet atomare Diffusion um oder entlang von Stufenkanten oder die Kanten von Inseln oder Löchern. In diesem Fall würde das betreffende Oberflächenfeature in die gleiche Richtung bewegt werden, in der sich auch die Elektronen bewegen.

Zusätzlicher Materialtransport kann bei solchen modellhaften Betrachtungen vernachlässigt werden.

Im hier vorgestellten Experiment lassen sich die beobachteten Bewegungen der Stufenkanten, Inseln und Löcher mit dem ersten Modell beschreiben.

Aufgrund der (001)-Orientierung der Oberfläche treten hauptsächlich rechteckige Oberflächenfeatures auf. Im Falle des zweiten Modells müsste das sich bewegendes Material um diese rechtwinkligen Kanten herum diffundieren, was zusätzliche Energie kosten würde. Darüber hinaus wird die rechtwinklige Form während des Experiments erhalten, was ebenfalls gegen Modell *ii.* spricht. Bei der von *Tao et al.* vorgestellten Arbeit [139] wurde dagegen eine Ag(111)-Oberfläche untersucht. Hier haben die Inseln aufgrund von 30° und 60° Winkeln eine eher rundliche Form und damit wird die Diffusion um die Kanten herum oder die Kanten entlang begünstigt.

Abschließend kann gesagt werden, dass das in Abbildung 6.4 gezeigte, einfache Anlagerungs- und Abtrennungs-Modell die hier vorgestellten experimentellen Resultate beschreibt. Zusammengekommen mit der beobachteten Materialdiffusionsrichtung kann die Windkraft als dominierende Kraft in einkristallinen, *in situ* präparierten Ag-Nanodrähten identifiziert werden und die Oberflächendiffusion auf diese Weise beschrieben werden.

Im Folgenden sollen Vergleiche zu ähnlichen Arbeiten auf dem Gebiet der Elektromigration an vergleichbaren Systemen gezogen werden, die ebenfalls im Rahmen des *Sonderforschungsbereichs 616 der Deutschen Forschungsgemeinschaft* an der *Universität Duisburg-Essen* durchgeführt wurden. Die angeführten Arbeiten der Gruppen um Herrn *Prof. Dr. G. Dumpich* und Herrn *Prof. Dr. M. Horn-von Hoegen* basieren ebenfalls auf dem hier verwendeten System Ag/Si(001). Darüber hinaus sollen vorhergehende Ergebnisse an diesem System, die in früheren Experimenten am Nanoprobe erzielt wurden, in die Betrachtung einfließen.

In der Arbeitsgruppe von Herrn *Prof. Dr. G. Dumpich* und auch in der Arbeitsgruppe von Herrn *Prof. Dr. M. Horn-von Hoegen* wurden verschiedene Modellsysteme in Bezug auf

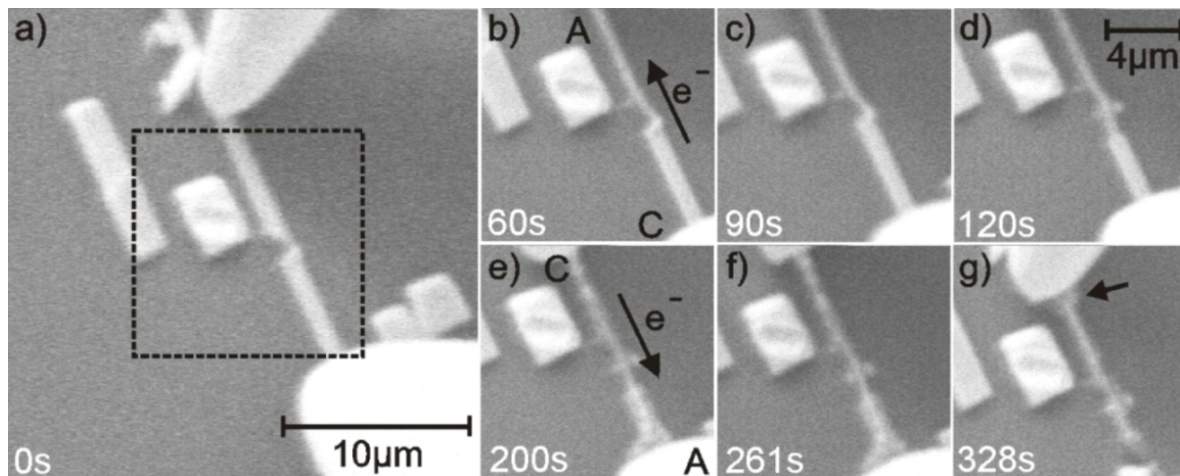


Abbildung 6.5.: SEM-Aufnahmen während einer Elektromigrationsmessung an Silber-Nanodrähten, gewachsen auf Si(001). Die makroskopische Materialbewegung ist entgegen der Elektronenbewegung gerichtet. Veröffentlicht in [101].

Elektromigration untersucht [49]. Es wurde u.a. gezeigt, dass polykristalline Strukturen ein anderes Elektromigrationsverhalten zeigen können als monokristalline Strukturen [140]. Im speziellen wurden polykristalline Gold-Nanodrähte mit monokristallinen Silber-Nanodrähten verglichen, wie sie auch in dieser Arbeit verwendet wurden. Die Drähte wurden in der Arbeit von *Stahlmecke et al.* [140] allerdings nicht, wie im Rahmen dieser Dissertation, *in situ* untersucht, sondern zunächst mittels Elektronenstrahlolithografie präpariert und anschließend in eine andere Analyseanlage transferiert. Überraschend war bei *Stahlmecke et al.* die Beobachtung, dass Löcher bzw. Fehlstellen an der Anode des Nanodrahts entstanden sind. Die einkristallinen Silber-Nanodrähte zeigten demnach ein Elektromigrationsverhalten, das von der direkten Kraft dominiert wird. Das bedeutet, dass Material sich entgegen der Stromrichtung bewegt und auf diese Weise eine Materialreduktion an der Anode stattgefunden hat. Dies wurde in einer weiteren Publikation verifiziert [141]. Diese Experimente wurden allesamt mittels eines SEM durchgeführt.

Auch in früheren Experimenten am Nanoprobe an einkristallinen Silber-Nanodrähten konnte (makroskopisch) mittels SEM beobachtet werden, dass Material an der jeweiligen Anodenseite abwandert und sich an der Kathode anlagert. Dies ist in Abbildung 6.5 zu sehen, die der damaligen Publikation entnommen ist. Das Material bewegte sich auch hier entgegen der Stromrichtung, entgegen der Bewegung der Elektronen [101]. Als dominierende Kraft wurde auch hier die direkte Kraft ausgemacht.

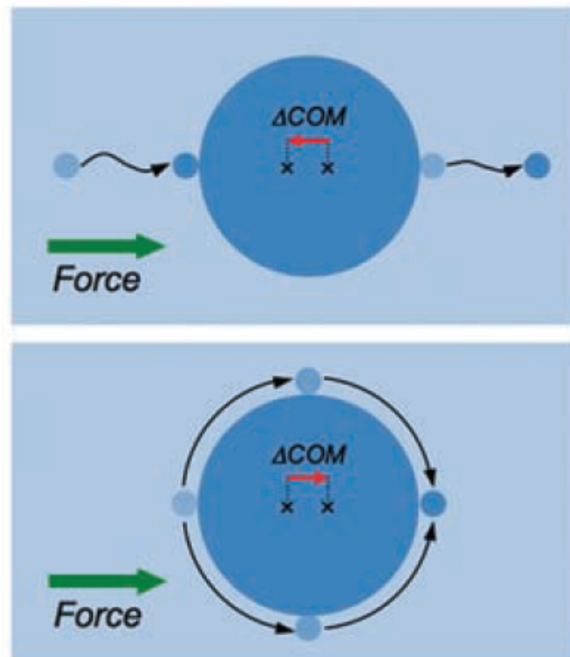


Abbildung 6.6.: Schematische Darstellung der Prozesse, die zur Materialbewegung im Falle vorherrschender Windkraft führen. In einem Fall bewegt sich die Insel gegen die Stromrichtung, im anderen Fall mit der Stromrichtung. (COM = Center of mass.) Aus [139].

Im aktuell diskutierten Experiment scheint dagegen die Windkraft wie oben beschrieben das Elektromigrationsverhalten der Silber-Nanodrähte zu bestimmen - untersucht auf mikroskopischer Skala mit dem STM. Alle zuvor genannten Experimente sind Experimente, die mit dem SEM durchgeführt wurden und daher in ihrer lateralen Auflösung dem STM im Vergleich unterlegen sind. Die Beobachtung und Interpretation solcher auf mikroskopischen Effekten basierenden Prozesse ist schwierig. Wie *Tao et al.* gezeigt haben sind selbst im Falle vorherrschender Windkraft zwei Szenarien denkbar, in denen makroskopische Oberflächenfeatures wie z.B. Inseln sich einmal mit den Elektronen bewegen und einmal genau entgegengesetzt [139] (vgl. Abbildung 6.6). Demnach ist die Aussage, wohin sich Oberflächenfeatures stromgetrieben bewegen, ohne tatsächlich die Bewegung einzelner Atome zu verfolgen bzw. rekonstruieren zu können, nicht eindeutig zu treffen.

Mit den Experimenten dieser Arbeit auf Silber-Nanodrähten wurde stromgetriebener Materialtransport auf kleinster Skala mit dem STM erfasst. Es können auf diese Weise Aussagen darüber getroffen werden, welche Elektromigrationskraft die dominierende ist. Die Interpre-

tation und die Resultate in diesem Experiment deuten auf die Windkraft als dominierende Kraft hin.

7. Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde der elektrische Transport und die dafür relevanten Prozesse auf atomarer Skala untersucht. Dies geschah sowohl mittels der Rastertunnelmikroskopie als auch mit Hilfe der Rastertunnelpotentiometrie, einer Erweiterung der Rastertunnelmikroskopie, die es erlaubt, die Verteilung des elektrochemischen Potentials mit atomarer Genauigkeit auf der untersuchten Oberfläche simultan mit der Topografie zu untersuchen. Durchgeführt wurden die Experimente mit einem Mehr-Sonden-Instrument im Ultrahochvakuum.

Folgende Systeme wurden mit Hilfe der Rastertunnelpotentiometrie untersucht:

Das elektrochemische Potential der $\text{Si}(111)-(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{-Ag}$ Oberfläche wurde in Abhängigkeit der Proben temperatur orts aufgelöst untersucht. Ein postulierter Phasenübergang, der bei ca. 220 K den Übergang von HCT- zu IET-Struktur und eine damit verbundene abrupte Änderung der Leitfähigkeit hervorrufen könnte, konnte nicht bestätigt werden. Der bekannte stufenförmige Verlauf des elektrochemischen Potentials bei Raumtemperatur konnte bei tieferen Temperaturen nicht beobachtet werden. Die Gründe hierfür liegen vermutlich in der Schwierigkeit, die Oberfläche bei diesen Temperaturen ideal zu kontaktieren, da die Kontakte ein stark temperaturabhängiges Verhalten zeigen. Die bei tieferen Temperaturen (als Raumtemperatur) zusätzlich auftretenden Überhöhungen des Potentialsignals an Stufenkanten konnten identifiziert und Thermospannungssignalen zugeschrieben werden.

Am System $\text{Ge}(001)c(8 \times 2)\text{-Au}$, das an seiner Oberfläche ein Atom dicke, eindimensional leitende Drähte ausbildet, wurden ebenfalls Rastertunnelpotentiometrie-Experimente durchgeführt. Hier konnte in Kooperation mit Mitarbeitern der *Jagiellonian University in Krakow, Poland*, gezeigt werden, dass die Oberfläche elektrisch leitend mit einer darunter vergrabenen Goldschicht verbunden ist. Der Potentialverlauf an der Oberfläche zeigt bei Raumtemperatur einen linearen Abfall. Die Existenz der Goldschicht wurde mittels Transmissionselektronenmikroskopie nachgewiesen. Auf der Oberfläche gewachsene Goldinseln sind nicht elektrisch mit den Drähten an der Oberfläche verbunden und können nicht dazu genutzt werden, die atomaren Drähte elektrisch zu kontaktieren.

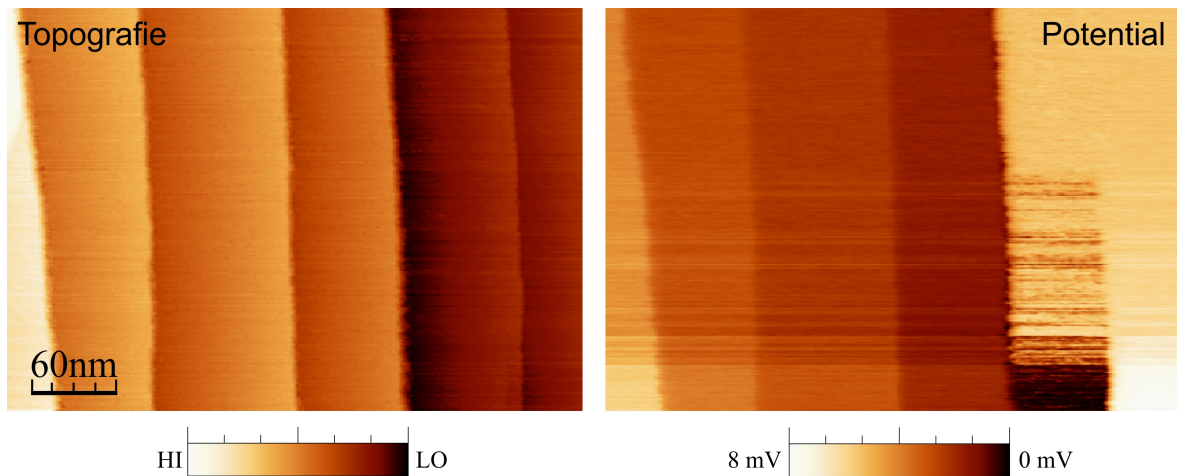


Abbildung 7.1.: Rastertunnelpotentiometrie an der Si(111)-(7×7) Oberfläche. Gezeigt sind Topografie und elektrochemisches Potential, welche simultan aufgenommen wurden. Die Querspannung U_q wurde hier senkrecht zu den Stufenkanten angelegt. Der stufenartige Verlauf konnte bei umgekehrter Polarität bestätigt werden. $U_q = 7.0 \text{ V}$, $I_q = 120 \mu\text{A}$, RT, $I_t = 25 \text{ pA}$.

Im Rahmen zukünftiger Arbeiten auf dem Gebiet der Rastertunnelpotentiometrie kann die Verteilung des elektrochemischen Potentials der Si(111)-(7×7) Oberflächenrekonstruktion untersucht werden. Schon jetzt wurden dazu Vorarbeiten durchgeführt, die als „*proof of principle*“-Experiment gelten können. Dazu zeigt Abbildung 7.1 sowohl die Topografie als auch das simultan gemessene elektrochemische Potential dieser Oberfläche bei Raumtemperatur. Man erkennt deutlich einen stufenförmigen Verlauf des Potentials, ähnlich dem der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag Oberfläche [4]. Diese bisherigen Arbeiten an der (7×7) Rekonstruktion sollen weiter ausgearbeitet werden um auch hier das elektrochemische Potential bzw. dessen Verlauf genau zu studieren. Auch die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit soll hier studiert werden.

Darüber hinaus kann die Methode der Rastertunnelpotentiometrie an einer ganzen Reihe von Systemen durchgeführt werden, die der Klasse der topologischen Isolatoren angehören. Das sind Systeme, deren elektrische Leitfähigkeit ausschließlich in der Oberfläche lokalisiert ist; das Volumenmaterial dagegen leitet den elektrischen Strom nicht, verhält sich wie ein Isolator [142, 143]. Hier sind Materialsysteme wie z.B. Bismutellurid (Bi_2Te_3), Bismutselenid (Bi_2Se_3) oder Bismutantimonid ($\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$) für nähere Untersuchungen denkbar, da in der Arbeitsgruppe von Prof. R. Möller bereits Erfahrung in der Präparation und Untersuchung von dünnen Bismutfilmen besteht [61]. Auch Antimon wurde bereits

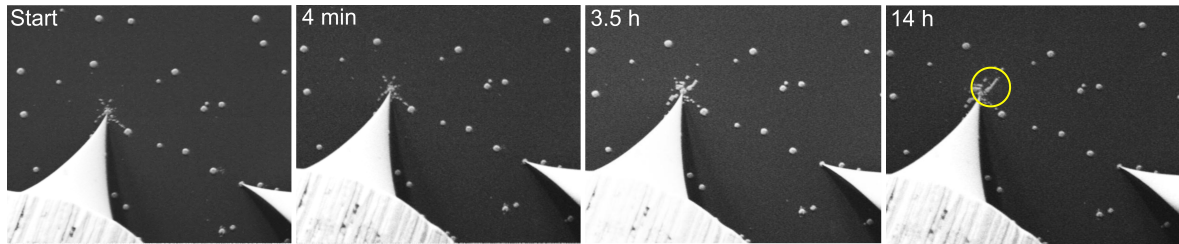


Abbildung 7.2.: Elektromigrationsexperiment an In/Si(111), beobachtet über 14 Stunden. Zwei Spitzen kontaktieren Indiuminseln auf der Oberfläche und legen eine elektrische Spannung an die Oberfläche an. Indium beginnt zu migrieren und bildet einen kristallinen Draht aus, der parallel zur Substratstufenorientierung wächst.

mittels Ballistischer Elektronen Emissions Mikroskopie (BEEM) untersucht [64, 144]. Erste Filme bestehend aus Bi_2Se_3 konnten bereits hergestellt und erste potentiometrische Untersuchungen durchgeführt werden [145]. Auch Untersuchungen an Graphen sind denkbar.

Mittels Rastertunnelmikroskopie konnten morphologische Änderungen der Oberfläche eines einkristallinen Silbernandradrahts untersucht werden, die durch Elektromigration verursacht wurden. Bei einer Stromdichte von $1.5 \cdot 10^7 \text{ Acm}^{-2}$ konnte gezeigt werden, dass Bewegungen von Oberflächenatomen ausgelöst werden, die wiederum in der Bewegung von Inseln, Löchern und Stufenkanten an der Oberfläche resultieren. Durch Umpolen des elektrischen Stroms, der die Bewegung induziert, konnte der Materialtransport ebenfalls umgekehrt werden. Die Interpretation der Messergebnisse kommt zu dem Schluß, dass die Windkraft, d.h. der Impulsübertrag der Leitungselektronen an die Atome des Festkörpergitters, die Elektromigration in diesem System dominiert.

Auf dem Gebiet der Elektromigration wurden bereits weitere Arbeiten durchgeführt. Dazu wurde das System In/Si(111) ausgewählt [146]. Hier gibt es erste Ergebnisse die andeuten, dass dieses System gut dafür geeignet ist, Elektromigration makroskopisch (mittels Rasterelektronenmikroskopie) und mikroskopisch (mittels Rastertunnelmikroskopie) zu untersuchen und damit möglicherweise ein vollständiges Bild der ursächlichen Effekte der Elektromigration zu geben. Erste Ergebnisse zeigen beispielsweise, wie die Elektromigration konstruktiv dazu genutzt werden kann, einen Indiumdraht gezielt wachsen zu lassen. Dies ist in der Bilderserie in Abbildung 7.2 dargestellt. Dieser Indiumdraht wächst kristallin und ist parallel zu den Substratstufen ausgerichtet. Somit gilt es, einstellbare Parameter

wie die Probentemperatur oder die Richtung der Substratstufen auf ihren Einfluss auf die Elektromigration zu untersuchen.

A. Anhang

A.1. Dimensionalität der elektrischen Leitfähigkeit in dünnen Schichten

Zur korrekten Interpretation der gemessenen Abstandsabhängigkeit des elektrischen Widerstands dünner, metallischer Schichten wird folgendes Modell betrachtet (siehe Abbildung A.1): Zwei Kontaktspitzen kontaktieren zwei Inseln auf der Oberfläche der Probe. Die Form der Kontaktflächen wird kreisförmig mit den Radien $r_{1,2}$ angenommen. Der Abstand beider Kontaktmittelpunkte beträgt $d = 2 \cdot a$ (die Mittelpunkte der Kreise liegen bei $\pm a$). Die beiden Kontaktspitzen prägen einen Strom auf, der entweder nur in der Oberfläche fließt (2D) oder auch das Substrat für den Stromfluss mit einschließt (3D) [147, 129].

Die Integration des elektrischen Feldes $\vec{E}(\vec{r})$ entlang des Weges $d\vec{r}$ liefert eine elektrische

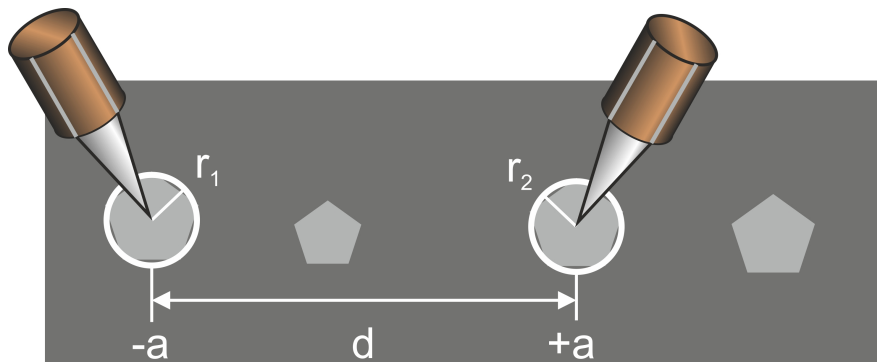


Abbildung A.1.: Bestimmung des abstandsabhängigen Widerstands. Die als kreisförmig angenommenen Kontaktinseln haben die Radien $r_{1,2}$ und liegen bei $\pm a$, der Abstand zwischen ihnen ist d .

Spannung U , die dem Widerstand R bei konstantem Strom proportional ist:

$$U = \int \vec{E}(\vec{r}) d\vec{r}$$

- **2D-Leitfähigkeit** Im zweidimensionalen Fall ist das elektrische Feld $E \propto \frac{1}{r}$, da die Feldverteilung von kreisförmigen (zylindrischen) Elektroden, die senkrecht in der Oberfläche stehen, betrachtet wird. Die Elektroden seien bei $\pm a$ lokalisiert. Mit Hilfe des Superpositionsprinzips folgt der elektrische Widerstand in diesem Fall einer logarithmischen Abstandsabhängigkeit:

$$R_{2D} \propto \int_{-a+r_1}^{+a-r_2} -\frac{1}{a-y} + \frac{1}{a+y} dy = \ln(2a - r_1) + \ln(2a - r_2) - \ln(r_1) - \ln(r_2)$$

Nähert man $r_{1,2} \ll d$ und setzt $d = 2 \cdot a$ ein folgt:

$$R_{2D} \propto 2 \cdot \ln(d) - \ln(r_1) - \ln(r_2) \quad (\text{A.1})$$

- **3D-Leitfähigkeit** Im dreidimensionalen Fall wird das elektrische Feld zweier beliebiger, kugelsymmetrischer Ladungsverteilungen betrachtet und es gilt $E \propto \frac{1}{r^2}$. Es folgt nach der Integration:

$$R_{3D} \propto \int_{-a+r_1}^{+a-r_2} -\frac{1}{(a-y)^2} + \frac{1}{(a+y)^2} dy = -\frac{1}{2a - r_1} - \frac{1}{2a - r_2} + \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}$$

Mit der Annahme $r_{1,2} \ll d$ und $d = 2 \cdot a$ folgt:

$$R_{3D} \propto -\frac{2}{d} + \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \quad (\text{A.2})$$

A.2. Verteilung des elektrischen Feldes \vec{E} und der Stromdichte \vec{j} in der Ebene

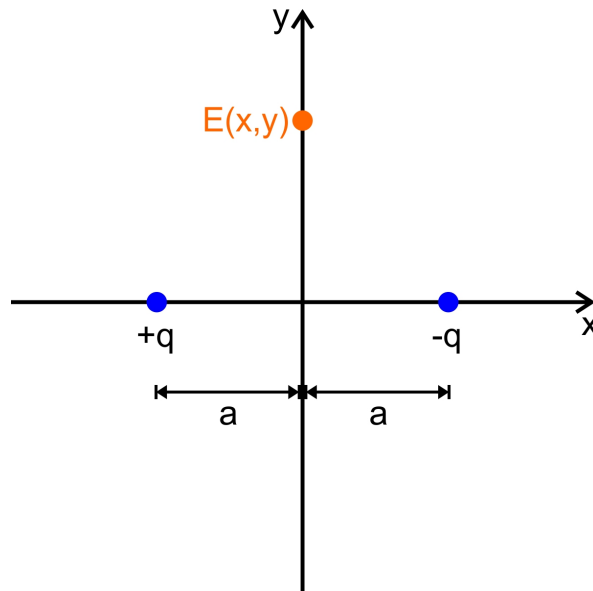


Abbildung A.2.: Veranschaulichung der Geometrie zur Bestimmung der Verteilungen des elektrischen Feldes und der Stromdichte im zweidimensionalen Fall.

Generell gilt nach dem Ohmschen Gesetz

$$\vec{E} = \hat{\sigma} \cdot \vec{j} \quad (\text{A.3})$$

\vec{E} ist der Vektor des elektrischen Feldes, $\hat{\sigma}$ der Leitfähigkeitstensor und \vec{j} der Stromdichtevektor. Um die Verteilung der Stromdichte $\vec{j}(x,y)$ in einer Ebene zu erhalten wird das elektrische Feld $\vec{E}(x,y)$ zweier Punktladungen $+q$ und $-q$ in zwei Dimensionen berechnet. Angenommen wird, dass das elektrische Feld nicht durch ein isotrop leitfähiges Material verändert wird. Die Punktladungen sollen gemäß Abbildung A.2 bei $x = -a$ und $x = +a$ (in beiden Fällen $y = 0$) lokalisiert sein. Der Begriff Punktladung impliziert bereits, dass die Ausdehnung der Kontaktflächen sehr klein gegenüber dem Abstand der beiden Kontakte sein muss.

Im zweidimensionalen Fall gilt für das elektrische Feld $\vec{E}(x,y)$:

$$|\vec{E}| \propto \frac{1}{|\vec{r}|}$$

Für das elektrische Feld $\vec{E}(x, y)$ folgt durch die Überlagerung der beiden elektrischen Felder der Punktladungen:

$$\vec{E}(x, y) = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} \frac{x+a}{(x+a)^2+y^2} - \frac{x-a}{(x-a)^2+y^2} \\ \frac{y}{(x+a)^2+y^2} - \frac{y}{(x-a)^2+y^2} \end{pmatrix}$$

Betrachtet man das resultierende elektrische Feld an der Symmetrieachse bei $x = 0$ folgt:

$$\vec{E}(x = 0) \propto \begin{pmatrix} \frac{2a}{a^2+y^2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Daraus¹ ergibt sich eine Lorentzverteilung:

$$E_x \propto \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{a}\right)^2} \quad (\text{A.4})$$

Die Breite der Lorentzverteilung ist $2 \cdot a$. Die Verteilung des elektrischen Feldes und damit auch die Stromdichteverteilung skaliert mit dem Abstand zwischen den Kontakten (in der in Kapitel 5.1 genutzten Nomenklatur gilt $2 \cdot a = l$).

¹ $E_x \propto \frac{2a}{a^2+y^2} = \frac{2a}{a^2 \cdot \left(1 + \frac{y^2}{a^2}\right)} = \frac{2}{a} \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{a}\right)^2}$

Literaturverzeichnis

- [1] INTEL CORPORATION, USA: *Datenblatt Intel® Core™ i7-3770 Processor (8M Cache, up to 3.90 GHz)*. Abgerufen am 05.12.2012,
- [2] GUPTA, R.P.: Theory of electromigration in noble and transition metals. In: *Phys. Rev. B* 25 (1982), S. 5188. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.25.5188>. – DOI 10.1103/PhysRevB.25.5188
- [3] CHU, C. S. ; SORBELLO, R. S.: Local-field Method for Resistivity and Electromigration in Metallic Microstructures: Application to Thin Films. In: *Phys. Rev. B* 38 (1988), Oktober, Nr. 11, 7260-7274. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.38.7260>. – DOI 10.1103/PhysRevB.38.7260
- [4] HOMOTH, J. ; WENDEROTH, M. ; DRUGA, T. ; WINKING, L. ; ULBRICH, R.G. ; BOBISCH, C.A. ; WEYERS, B. ; BANNANI, A. ; ZUBKOV, E. ; BERNHART, A.M. ; KASPERS, M.R. ; MÖLLER, R.: Electronic Transport on the Nanoscale: Ballistic Transmission and Ohm's Law. In: *Nano Letters* 9 (2009), S. 1588. <http://dx.doi.org/10.1021/nl803783g>. – DOI 10.1021/nl803783g
- [5] SCHÄFER, J. ; BLUMENSTEIN, C. ; MEYER, S. ; WISNIEWSKI, M. ; CLAESSEN, R.: New model system for a one-dimensional electron liquid: Self-organized atomic gold chains on Ge(001). In: *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008), S. 236802. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.236802>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.101.236802
- [6] BLUMENSTEIN, C. ; SCHÄFER, J. ; MIETKE, S. ; MEYER, S. ; DOLLINGER, A. ; LOCHNER, M. ; CUI, X.Y. ; PATTHEY, L. ; MATZDORF, R. ; CLAESSEN, R.: Atomically controlled quantum chains hosting a Tomonaga-Luttinger liquid. In: *Nature Physics* 7 (2011), S. 776–780. <http://dx.doi.org/10.1038/NPHYS2051>. – DOI 10.1038/NPHYS2051

- [7] HO, P. ; KWOK, T.: Electromigration in Metals. In: *Rep. Prog. Phys.* 52 (1989), Jan, 301-348. <http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/52/3/002>. – DOI 10.1088/0034-4885/52/3/002
- [8] YASUNAGA, H. ; NATORI, A.: Electromigration on semiconductor surfaces. In: *Surf. Sci. Rep.* 15 (1992), S. 205–280. [http://dx.doi.org/10.1016/0167-5729\(92\)90007-X](http://dx.doi.org/10.1016/0167-5729(92)90007-X). – DOI 10.1016/0167-5729(92)90007-X
- [9] PIERCE, D. G. ; BRUSIUS, P. G.: Electromigration: A review. In: *Microelectronics Reliability* 37 (1997), S. 1053–1072. [http://dx.doi.org/10.1016/S0026-2714\(96\)00268-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0026-2714(96)00268-5). – DOI 10.1016/S0026-2714(96)00268-5
- [10] TU, K. N.: Recent advances on electromigration in very-large-scale-integration of interconnects. In: *J. Appl. Phys.* 94 (2003), S. 5451–5473. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1611263>. – DOI 10.1063/1.1611263
- [11] GIESEN, M.: Step and island dynamics at solid/vacuum and solid/liquid interfaces. In: *Prog. Surf. Sci.* 68 (2001), S. 1–154. [http://dx.doi.org/10.1016/S0079-6816\(00\)00021-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0079-6816(00)00021-6). – DOI 10.1016/S0079-6816(00)00021-6
- [12] BINNIG, G. ; ROHRER, H. ; GERBER, Ch. ; WEIBEL, E.: Tunneling through a controllable vacuum gap. In: *Appl. Phys. Lett.* 40 (1982), S. 178. <http://dx.doi.org/10.1063/1.92999>. – DOI 10.1063/1.92999
- [13] BINNIG, G. ; ROHRER, H. ; GERBER, Ch. ; WEIBEL, E.: Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy. In: *Phys. Rev. Lett.* 49 (1982), Jan, S. 57–61. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.57>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.49.57
- [14] BINNIG, G. ; ROHRER, H. ; GERBER, Ch. ; WEIBEL, E.: 7×7 Reconstruction on Si (111) Resolved in Real Space. In: *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983), Jan, 120-123. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.120>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.50.120
- [15] BINNIG, G. ; ROHRER, H.: Scanning Tunneling Microscopy - from Birth to Adolescence. In: *Rev. Mod. Phys.* 59 (1987), S. 615–625. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.59.615>. – DOI 10.1103/RevModPhys.59.615
- [16] www.nobelprize.org

- [17] TERSOFF, J. ; HAMANN, D.R.: Theory and Application for the Scanning Tunneling Microscope. In: *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983), S. 1998–2001. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.1998>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.50.1998
- [18] TERSOFF, J. ; HAMANN, D.R.: Theory of the Scanning Tunneling Microscope. In: *Phys. Rev. B* 31 (1985), Jan, 805–813. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.31.805>. – DOI 10.1103/PhysRevB.31.805
- [19] BARDEEN, J.: Tunneling from a Many-Particle Point of View. In: *Phys. Rev. Lett.* 6 (1961), S. 57–59. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.6.57>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.6.57
- [20] DATTA, S.: *Electron Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 2003
- [21] HOMOTH, J.: *Das elektrochemische Potential auf der atomaren Skala: Untersuchung des Ladungstransports eines stromtragenden zweidimensionalen Elektronengases mit Hilfe der Raster-Tunnel-Potentiometrie*, Georg-August-Universität zu Göttingen, Diss., 2008
- [22] SCHNEIDER, M.A. ; WENDEROTH, M. ; HEINRICH, A.J. ; ROSENTERETER, M.A ; ULBRICH, R.G.: Current transport through single grain boundaries: A scanning tunneling potentiometry study. In: *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996), S. 1327. <http://dx.doi.org/10.1063/1.117583>. – DOI 10.1063/1.117583
- [23] DRUDE, P.: Zur Elektronentheorie der Metalle. In: *Annalen der Physik* 306 (1900), S. 566–613. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.19003060312>. – DOI 10.1002/andp.19003060312
- [24] LANDAUER, R.: Spatial Variation of Currents and Fields due to Localized Scatterers in Metallic Conduction. In: *IBM J. Res. Dev.* 1 (1957), 223–231. <http://www.research.ibm.com/journal/50th/fundamental/landauer.html>
- [25] LANDAUER, R.: Spatial Variation of Currents and Fields due to Localized Scatterers in Metallic Conduction. In: *IBM J. Res. Dev.* 32 (1988), S. 306. <http://dx.doi.org/10.1147/rd.323.0306>. – DOI 10.1147/rd.323.0306

- [26] LANDAUER, R.: Conductance from transmission: common sense points. In: *Phys. Scr.* 1992 (1992), S. 110–114. <http://dx.doi.org/10.1088/0031-8949/1992/T42/020>. – DOI 10.1088/0031-8949/1992/T42/020
- [27] IMRY, Y. ; LANDAUER, R.: Conductance Viewed as Transmission. In: *Rev. Mod. Phys.* 71 (1999), März, Nr. 2, S306–S312. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.71.S306>. – DOI 10.1103/RevModPhys.71.S306
- [28] WEES, B.J. van ; HOUTEN, H. van ; BEENAKKER, W.J. ; WILLIAMSON, J.G. ; KOUWENHOVEN, L.P. ; MAREL, D. van d. ; FOXON, C.T.: Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. In: *Phys. Rev. Lett.* 60 (1988), S. 848–850. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.848>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.60.848
- [29] MURALT, P. ; POHL, D.: Scanning Tunneling Potentiometry. In: *Appl. Phys. Lett.* 48 (1986), Jan, S. 514–516. <http://dx.doi.org/10.1063/1.96491>. – DOI 10.1063/1.96491
- [30] BRINER, B.G. ; FEENSTRA, R.M. ; CHIN, T.P. ; WOODALL, J.M.: Local Transport Properties of Thin Bismuth Films Studied by Scanning Tunneling Potentiometry. In: *Phys. Rev. B* 54 (1996), Jan, Nr. 8, 5283-5286. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.R5283>
- [31] JI, Shuai-Hua ; HANNON, J.B. ; TROMP, R.M. ; PEREBEINOS, V. ; TERSOFF, J. ; ROSS, F.M.: Atomic-scale transport in epitaxial graphene. In: *Nat. Mater.* 11 (2011), S. 114–119. <http://dx.doi.org/10.1038/nmat3170>. – DOI 10.1038/nmat3170
- [32] HOMOTH, J. ; WENDEROTH, M. ; ENGEL, K. J. ; DRUGA, T. ; LOTH, S. ; ULBRICH, R. G.: Reconstruction of the local density of states in Ag(111) surfaces using scanning tunneling potentiometry. In: *Phys. Rev. B* 76 (2007), S. 193407. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.76.193407>. – DOI 10.1103/PhysRevB.76.193407
- [33] BOBISCH, C.A. ; MÖLLER, R.: Electron transport at surfaces and interfaces. In: *CHIMIA International Journal for Chemistry* 66 (2012), February, Nr. 1, S. 23–30. <http://dx.doi.org/10.2533/chimia.2012.23>. – DOI 10.2533/chimia.2012.23

- [34] BANNANI, A. ; BOBISCH, C.A. ; MÖLLER, R.: Local potentiometry using a multi-probe scanning tunneling microscope. In: *Rev. Sci. Instrum.* 79 (2008), S. 083704. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2968111>. – DOI 10.1063/1.2968111
- [35] BANNANI, A.: *Ladungstransport in dünnen metallischen Filmen*, Universität Duisburg-Essen, Germany, Diss., 2007
- [36] MÖLLER, R. ; ESSLINGER, A. ; KOSLOWSKI, B.: Noise in Vacuum Tunneling: Application for a Novel Scanning Microscope. In: *Appl. Phys. Lett.* 55 (1989), Jan, 2360-2362. <http://dx.doi.org/10.1063/1.102018>. – DOI 10.1063/1.102018
- [37] MÖLLER, R. ; ESSLINGER, A. ; KOSLOWSKI, B.: Thermal Noise in Vacuum Scanning Tunneling Microscopy at Zero Bias Voltage. In: *J. Vac. Sci. Technol. A* 8 (1990), Jan, 590-593. <http://dx.doi.org/10.1116/1.576348>. – DOI 10.1116/1.576348
- [38] MÖLLER, R. ; BAUR, C. ; ESSLINGER, A. ; KÜRZ, P.: Scanning Noise Potentiometry. In: *J. Vac. Sci. Technol. B* 9 (1991), Jan, 609-611. <http://link.aip.org/link/?JVTBD9/9/609/1>
- [39] MÖLLER, R. ; WIESENDANGER, R. (Hrsg.): *Scanning Probe Microscopy - Analytical Methods*. Springer, 1998
- [40] WILLIAMS, C.C. ; WICKRAMASINGHE, H.K.: Microscopy of chemical-potential variations on an atomic scale. In: *Nature* 344 (1990), S. 317–319. <http://dx.doi.org/10.1038/344317a0>. – DOI 10.1038/344317a0
- [41] HOFFMANN, D. ; RETTENBERGER, A. ; LÄUGER, K. ; GRAND, J.Y. ; MÖLLER, R.: Thermovoltage across a vacuum barrier investigated by scanning tunneling microscopy: Imaging of standing electron waves. In: *Phys. Rev. B* 52 (1995), S. 13796–13798. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.52.13796>. – DOI 10.1103/PhysRevB.52.13796
- [42] HOFFMANN, D. ; HAAS, A. ; KUNSTMANN, T. ; SEIFRITZ, J. ; MÖLLER, R.: Thermovoltage in scanning tunneling microscopy. In: *J. Vac. Sci. Technol. A* 15 (1997), S. 1418. <http://dx.doi.org/10.1116/1.580553>. – DOI 10.1116/1.580553
- [43] HOFFMANN, D. ; SEIFRITZ, J. ; WEYERS, B. ; MÖLLER, R.: Thermovoltage in scanning tunneling microscopy. In: *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*

- nomena* 109 (2000), S. 117–125. [http://dx.doi.org/10.1016/S0368-2048\(00\)00111-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0368-2048(00)00111-0). – DOI 10.1016/S0368-2048(00)00111-0
- [44] LEAVENS, C.R. ; AERS, G.C.: Vacuum tunneling thermopower: Normal metal electrodes. In: *Solid State Communications* 61 (1987), Nr. 5, S. 289–295. [http://dx.doi.org/10.1016/0038-1098\(87\)90299-7](http://dx.doi.org/10.1016/0038-1098(87)90299-7). – DOI 10.1016/0038-1098(87)90299-7
- [45] STOVNENG, J.A. ; LIPAŮSKÝ, P.: Thermopower in scanning-tunneling-microscope experiments. In: *Phys. Rev. B* 42 (1990), Nr. 14, S. 9214. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.42.9214>. – DOI 10.1103/PhysRevB.42.9214
- [46] BOSVIEUX, C. ; FRIEDEL, J.: Sur l'electrolyse des alliages metalliques. In: *J. Phys. Chem. Solids* 23 (1962), Nr. 1-2, S. 123–136. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697\(62\)90066-5](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697(62)90066-5). – DOI 10.1016/0022-3697(62)90066-5
- [47] LANDAUER, R. ; WOO, J.W.F.: Driving force in electromigration. In: *Phys. Rev. B* 10 (1974), Nr. 4, S. 1266–1271. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.10.1266>. – DOI 10.1103/PhysRevB.10.1266
- [48] LODDER, A.: Electromigration theory unified. In: *Europhys. Lett.* 72 (2005), Nr. 5, S. 774–780. <http://dx.doi.org/10.1209/epl/i2005-10306-9>. – DOI 10.1209/epl/i2005-10306-9
- [49] STAHLMECKE, B.: *Elektromigration in Gold und Silber Nanostrukturen*, Universität Duisburg-Essen, Germany, Diss., 2008
- [50] DEKKER, J.P. ; LODDER, A. ; EK, J. van: Theory for the electromigration wind force in dilute alloys. In: *Phys. Rev. B* 56 (1997), Nr. 19, S. 12167–12177. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.56.12167>. – DOI 10.1103/PhysRevB.56.12167
- [51] BEVAN, K.H. ; GUO, H. ; WILLIAMS, E.D. ; ZHANG, Z.: First-principles quantum transport theory of the enhanced wind force driving electromigration on Ag(111). In: *Phys. Rev. B* 81 (2010), Nr. 23, S. 235416. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.235416>. – DOI 10.1103/PhysRevB.81.235416
- [52] LATZ, A. ; SINDERMAN, S. ; BRENDL, L. ; DUMPICH, G. ; HERINGDORF, F.-J. M. ; WOLF, D.E.: Simulation of electromigration effects on voids in monocry-

- stalline Ag films. In: *Phys. Rev. B* 85 (2012), Nr. 3, S. 035449. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.85.035449>. – DOI 10.1103/PhysRevB.85.035449
- [53] HUNTINGTON, H.B. ; GRONE, A.R.: Current-induced marker motion in gold wires. In: *J. Phys. Chem. Solids* 20 (1961), Nr. 1-2, S. 76–87. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697\(61\)90138-X](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697(61)90138-X). – DOI 10.1016/0022-3697(61)90138-X
- [54] TU, K.N.: Electromigration in stressed thin films. In: *Phys. Rev. B* 45 (1992), Nr. 3, S. 1409–1413. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.45.1409>. – DOI 10.1103/PhysRevB.45.1409
- [55] SORBELLO, R.S. ; LODDER, A. ; HOVING, S.J.: Finite-cluster description of electromigration. In: *Phys. Rev. B* 25 (1982), Nr. 10, S. 6178–6187. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.25.6178>. – DOI 10.1103/PhysRevB.25.6178
- [56] RIMBEY, P.R. ; SORBELLO, R.S.: Strong-coupling theory for the driving force in electromigration. In: *Phys. Rev. B* 21 (1980), Nr. 6, S. 2150–2161. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.21.2150>. – DOI 10.1103/PhysRevB.21.2150
- [57] LODDER, A. ; DEKKER, J.P.: The electromigration force in metallic bulk. In: *AIP Conf. Proc.* 418 (1997), S. 315–328. <http://dx.doi.org/10.1063/1.54652>. – DOI 10.1063/1.54652
- [58] TU, K.N.: *Springer Series in Materials Science*, 1. Bd. 117: *Fundamentals of Electromigration*. Solder Joint Technology, II. Springer, 2007. – 211–243 S. http://dx.doi.org/10.1007/978-0-387-38892-2_8. http://dx.doi.org/10.1007/978-0-387-38892-2_8
- [59] Omicron Nanotechnology GmbH. www.omicron.de
- [60] BOBISCH, C. A.: *Mikroskopie mit ballistischen Elektronen, Dissertation*, Universität Duisburg-Essen, Germany, Diss., 2007
- [61] BANNANI, A. ; BOBISCH, C. ; MÖLLER, R.: Ballistic Electron Microscopy of Individual Molecules. In: *Science* 315 (2007), Nr. 5820, 1824–1828. <http://www.sciencemag.org/cgi/content/abstract/315/5820/1824>

- [62] BOBISCH, C. ; BANNANI, A. ; MATENA, M. ; MÖLLER, R.: Ultrathin Bi films on Si(100). In: *Nanotechnology* 18 (2007), Jan, Nr. 5, 055606. <http://dx.doi.org/10.1088/0957-4484/18/5/055606>. – DOI 10.1088/0957-4484/18/5/055606
- [63] BOBISCH, C.A. ; BANNANI, A. ; KOROTEEV, Yu. M. ; BIHLMAYER, G. ; CHULKOV, E.V. ; MÖLLER, R.: Conservation of the lateral electron momentum at a metal-semiconductor interface studied by ballistic electron emission microscopy. In: *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), S. 136807. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.136807>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.102.136807
- [64] BERNHART, A.M.: *Mikroskopie mit ballistischen Elektronen und Löchern*, Universität Duisburg-Essen, Duisburg, Germany, Diss., 2012
- [65] SEAH, M. P. ; DENCH, W. A.: Quantitative Electron Spectroscopy of Surfaces: A Standard Data Base for Electron Inelastic Mean Free Paths in Solids. In: *Surface and Interface Analysis* 1 (1979), S. 2–11. <http://dx.doi.org/10.1002/sia.740010103>. – DOI 10.1002/sia.740010103
- [66] HENZLER, M. ; GÖPEL, W.: *Oberflächenphysik des Festkörpers*. B.G. Teubner Stuttgart, 1994
- [67] STAIB INSTRUMENTE GMBH, Germany: *User manual Nanofocus 50*, March 2011
- [68] BACHMANN, S.: *Die Präparation von Spitzen für die dynamische Rasterkraftmikroskopie*. Bachelorarbeit, Universität Duisburg-Essen, Germany, 2011
- [69] VÖRDEN, D. van ; LANGE, M. ; BACHMANN, S. ; NOTTHOFF, C. ; MÖLLER, R.: The effect of different tip preparations on force distance curves. In: *to be published* (2012)
- [70] HÜNLEIN, C. ; KLEIN, A.K.: *Präparation und Charakterisierung von Tunnelspitzen*. Projektarbeit, Universität Duisburg-Essen, Germany, 2010
- [71] IBE, J.P. ; BEY, P.P. ; BRANDOW, S.L. ; BRIZZOLARA, R.A. ; BURNHAM, N.A. ; DiLELLA, D.P. ; LEE, K.P. ; MARRIAN, C.R.K. ; COLTON, R.J.: On the electrochemical etching of tips for scanning tunneling microscopy. In: *J. Vac. Sci. Technol. A* 8 (1990), Nr. 4, S. 3570. <http://dx.doi.org/10.1116/1.576509>. – DOI 10.1116/1.576509

- [72] MELMED, A.J.: The art and science and other aspects of making sharp tips. In: *J. Vac. Sci. Technol. B* 9 (1991), Nr. 2, S. 601. <http://dx.doi.org/10.1116/1.585467>. – DOI 10.1116/1.585467
- [73] NAM, A.J. ; TEREN, A. ; LUSBY, T.A. ; MELMED, A.J.: Benign making of sharp tips for STM and FIM: Pt, Ir, Au, Pd and Rh. In: *J. Vac. Sci. Technol. B* 13 (1995), Nr. 4, S. 1556. <http://dx.doi.org/10.1116/1.588186>. – DOI 10.1116/1.588186
- [74] EISELE, M. ; KRÜGER, M. ; SCHENK, M. ; ZIEGLER, A. ; HOMMELHOFF, P.: Note: Production of sharp gold tips with high surface quality. In: *Rev. Sci. Instrum.* 82 (2011), S. 026101. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3534078>. – DOI 10.1063/1.3534078
- [75] REN, B. ; PICARDI, G. ; PETTINGER, B.: Preparation of gold tips suitable for tip-enhanced Raman spectroscopy and light emission by electrochemical etching. In: *Rev. Sci. Instrum.* 75 (2004), S. 837. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1688442>. – DOI 10.1063/1.1688442
- [76] BILLOT, L. ; BERGUIGA, L. ; CHAPELLE, M.L. de l. ; GILBERT, Y. ; BACHELOT, R.: Production of gold tips for tip-enhanced near-field optical microscopy and spectroscopy: analysis of the etching parameters. In: *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 31 (2005), S. 139–145. <http://dx.doi.org/10.1051/epjap:2005049>. – DOI 10.1051/epjap:2005049
- [77] LUCIER, A.-S.: *Preparation and characterization of tungsten tips suitable for molecular electronics studies*, McGill University, Montréal, Canada, Diss., 2004
- [78] HAGEDORN, T.: *Atomic contacts characterized by force and current*, McGill University, Montréal, Canada, Diss., 2010
- [79] FOWLER, R.H. ; NORDHEIM, L.: Electron emission in intense electric fields. In: *Proc. R. Soc. Lond. A* 119 (1928), Nr. 781, S. 173–181. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1928.0091>. – DOI 10.1098/rspa.1928.0091
- [80] ZANGWILL, A.: *Physics at Surfaces*. Cambridge University Press, 1988
- [81] BECKER, R.S. ; GOLOVCHENKO, J.A. ; MCRAE, E.G. ; SWARTZENTRUBER, B.S.: Tunneling images of atomic steps on the Si(111) 7×7 surface. In: *Phys. Rev. Lett.*

- 55 (1985), Nr. 19, S. 2028–2031. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.55.2028>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.55.2028
- [82] STEPHENSON, A.W. ; BADDELEY, C.J. ; TIKHOV, M.S. ; LAMBERT, R.M.: Nucleation and growth of catalytically active Pd islands on Au(111)- $22 \times \sqrt{3}$ studied by scanning tunneling microscopy. In: *Surface Science* 398 (1998), S. 172–183. [http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028\(98\)80021-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028(98)80021-6). – DOI 10.1016/S0039-6028(98)80021-6
- [83] *Soft dB*. www.softdb.com
- [84] ZAHL, P. ; WAGNER, Th. ; MÖLLER, R. ; KLUST, A.: Open source scanning probe microscopy control software package GXSM. In: *J. Vac. Sci. Technol. B* 28 (2010), S. C4E39. <http://dx.doi.org/10.1116/1.3374719>. – DOI 10.1116/1.3374719
- [85] *Microsoft Windows*. <http://windows.microsoft.com/de-at/windows/home>
- [86] *Nanotec Electronica*. <http://www.nanotec.es/products/wsxm/index.php>
- [87] HORCAS, I. ; FERNÁNDEZ, R. ; GÓMEZ-RODRÍGUEZ, J. M. ; COLCHERO, J. ; GÓMEZ-HERRERO, J. ; BARO, A. M.: WSXM: a Software for Scanning Probe Microscopy and a Tool for Nanotechnology. In: *Rev. Sci. Instrum.* 78 (2007), Jan, Nr. 1, 013705. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2432410>. – DOI 10.1063/1.2432410
- [88] *OriginLab*. <http://www.originlab.de/>
- [89] SCHLIER, R. E. ; FARNSWORTH, H. E.: Structure and adsorption characteristics of clean surfaces of Germanium and Silicon. In: *J. Chem. Phys.* 30 (1959), Nr. 4, S. 917–926. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1730126>. – DOI 10.1063/1.1730126
- [90] OSAKABE, N. ; TANISHIRO, Y. ; YAGI, K. ; HONJO, G.: Direct observation of the phase transition between the (7×7) and (1×1) structures of clean (111) silicon surfaces. In: *Surf. Sci.* 109 (1981), Nr. 2, S. 353–366. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(81\)90493-3](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(81)90493-3). – DOI 10.1016/0039-6028(81)90493-3
- [91] UENO, M. ; MATSUDA, I. ; LIU, C. ; HASEGAWA, S.: Step Edges as Reservoirs of Ag Adatom Gas on a Si(111) Surface. In: *Jpn. J. Appl. Phys.* 42 (2003), S. 4894–4897. <http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.42.4894>. – DOI 10.1143/JJAP.42.4894

- [92] KASPERS, M.R.: *Potentiometrie auf metallischen Oberflächen*, Universität Duisburg-Essen, Germany, Diplomarbeit, 2008
- [93] GALLAGHER, M.C. ; MELNIK, S. ; MAHLER, D.: Temperature- and exposure-dependent study of the Ge(001)c(8 × 2)-Au surface. In: *Phys. Rev. B* 83 (2011), S. 033302. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.83.033302>. – DOI 10.1103/PhysRevB.83.033302
- [94] LOPEZ-MORENO, S. ; ROMERO, A.H. ; MUNOZ, A. ; SCHWINGENSCHLÖGL, U.: First-principles description of atomic gold chains on Ge(001). In: *Phys. Rev. B* 81 (2010), S. 041415. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.041415>. – DOI 10.1103/PhysRevB.81.041415
- [95] MEYER, S. ; SCHÄFER, J. ; BLUMENSTEIN, C. ; HÖPFNER, P. ; BOSTWICK, A. ; MCCHESENEY, J.L. ; ROTENBERG, E. ; CLAESSEN, R.: Strictly one-dimensional electron system in Au chains on Ge(001) revealed by photoelectron k-space mapping. In: *Phys. Rev. B* 83 (2011), S. 121411. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.83.121411>. – DOI 10.1103/PhysRevB.83.121411
- [96] HOUSELT, A. van ; FISCHER, M. ; POELSEMA, B. ; ZANDVLIET, H.J.W.: Giant missing row reconstruction of Au on Ge(001). In: *Phys. Rev. B* 78 (2008), S. 233410. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.233410>. – DOI 10.1103/PhysRevB.78.233410
- [97] SAUER, S. ; FUCHS, F. ; BECHSTEDT, F. ; BLUMENSTEIN, C. ; SCHÄFER, J.: First-principles studies of Au-induced nanowires on Ge(001). In: *Phys. Rev. B* 81 (2010), S. 075412. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.075412>. – DOI 10.1103/PhysRevB.81.075412
- [98] WANG, J. ; LI, M. ; ALTMAN, E.I.: Scanning tunneling microscopy study of Au growth on Ge(001): Bulk migration, self-organization, and clustering. In: *Surf. Sci.* 596 (2005), Nr. 1-3, S. 126–143. <http://dx.doi.org/10.1016/j.susc.2005.09.009>. – DOI 10.1016/j.susc.2005.09.009
- [99] WANG, J. ; LI, M. ; ALTMAN, E.I.: Scanning tunneling microscopy study of self-organized Au atomic chain growth on Ge(001). In: *Phys. Rev. B* 70 (2004), S. 233312. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.70.233312>. – DOI 10.1103/PhysRevB.70.233312

- [100] BENSON, J.A. ; HANSEN, J.C. ; McELLISTREM, M.T. ; CLENDENING, W.D. ; TOBIN, J.G.: An investigation of the Au/Ge(001) interface. In: *Surf. Sci.* 193 (1988), Nr. 1-2, S. L37–L46. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(88\)90315-9](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(88)90315-9). – DOI 10.1016/0039-6028(88)90315-9
- [101] KASPERS, M.R. ; BERNHART, A.M. ; HERINGDORF, F.-J. M. ; DUMPICH, G. ; MÖLLER, R.: Electromigration and potentiometry measurements of single-crystalline Ag nanowires under UHV conditions. In: *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009), S. 265601. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/26/265601>. – DOI 10.1088/0953-8984/21/26/265601
- [102] KASPERS, M.R. ; BERNHART, A.M. ; BOBISCH, C.A. ; MÖLLER, R.: Current induced surface diffusion on a single-crystalline silver nanowire. In: *Nanotechnology* 23 (2012), S. 205706. <http://dx.doi.org/10.1088/0957-4484/23/20/205706>. – DOI 10.1088/0957-4484/23/20/205706
- [103] ROOS, K. R. ; ROOS, K. L. ; HOEGEN, M. H. ; HERINGDORF, F.-J. M.: High Temperature Self-Assembly of Ag-Nanowires on Vicinal Si(001). In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 17 (2005), Nr. 16, S. 1407–1414. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/17/16/011>. – DOI 10.1088/0953-8984/17/16/011
- [104] CHADI, D. J.: Stabilities of Single-layer and Bilayer-steps on Si(001) Surfaces. In: *Phys. Rev. Lett.* 59 (1987), Nr. 15, S. 1691–1694. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.59.1691>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.59.1691
- [105] WASSERFALL, J. ; RANKE, W.: Arsenic Interaction with Vicinal Si(001) Surfaces. In: *Surf. Sci.* 315 (1994), Nr. 3, S. 237–247. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(94\)90128-7](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(94)90128-7). – DOI 10.1016/0039-6028(94)90128-7
- [106] MICHELY, T. ; REUTER, M. C. ; COPEL, M. ; TROMP, R. M.: Symmetry, Structure, and Step Induced Ordering of the Si(001)-(2 × 3)Ag Surface. In: *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994), S. 2095–2098. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.73.2095>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.73.2095
- [107] LIN, X.F. ; WAN, K.J. ; NOGAMI, J.: Surface Reconstructions in the Ag/Si(100) System. In: *Phys. Rev. B* 49 (1994), Nr. 11, S. 7385–7393. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.49.7385>. – DOI 10.1103/PhysRevB.49.7385

- [108] BOBISCH, C.A. ; BERNHART, A.M. ; KASPERS, M.R. ; COTTIN, M.C. ; SCHAF-FERT, J. ; MÖLLER, R. ; JOACHIM, C. (Hrsg.): *Electronic Transport on the Nanoscale*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012 (Advances in Atom and Single Molecule Machines, Atomic Scale Interconnection Machines). – 197–214 S. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-28172-3_15. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-28172-3_15
- [109] DRUGA, Th. C.: *Nanoskalige Ladungstransportuntersuchungen am zweidimensionalen Elektronengas der Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag-Oberfläche mit Hilfe der Rastertunnelpotentiometrie*, IV. Physikalisches Institut der Georg-August-Universität zu Göttingen, Diplomarbeit, 2007
- [110] ZUBKOV, E.: *Elektronentransport in ultradünnen Schichten*, Universität Duisburg-Essen, Germany, Diplomarbeit, 2007
- [111] TAKAHASHI, T. ; NAKATANI, S. ; OKAMOTO, N. ; ISHIKAWA, T. ; KIKUTA, S.: Study on the Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag Surface Structure by X-ray Diffraction. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 27 (1988), S. 753–755
- [112] KATAYAMA, M. ; WILLIAMS, R.S. ; KATO, M. ; NOMURA, E. ; AONO, M.: Structure analysis of the Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ R30°-Ag surface. In: *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991), S. 2762. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.66.2762>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.66.2762
- [113] TAKAHASHI, T. ; NAKATANI, S. ; OKAMOTO, N. ; ISHIKAWA, T. ; KIKUTA, S.: A study of the Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag surface by transmission X-ray diffraction and X-ray diffraction topography. In: *Surf. Sci.* 242 (1991), S. 54–58. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(91\)90241-J](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(91)90241-J). – DOI 10.1016/0039-6028(91)90241-J
- [114] AIZAWA, H. ; TSUKADA, M. ; SATO, N. ; HASEGAWA, S.: Asymmetric structure of the Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag surface. In: *Surf. Sci.* 429 (1999), S. L509–L514. [http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028\(99\)00424-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028(99)00424-0). – DOI 10.1016/S0039-6028(99)00424-0
- [115] WATANABE, S. ; KONDO, Y. ; NAKAMURA, Y. ; NAKAMURA, J.: Atomic and electronic structure of the Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag surface reexamined using first-principles calculations. In: *Sci. Technol. Adv. Mater.* 1 (2000), S. 167. [http://dx.doi.org/10.1016/S1468-6996\(00\)00019-X](http://dx.doi.org/10.1016/S1468-6996(00)00019-X). – DOI 10.1016/S1468-6996(00)00019-X

- [116] WAN, K. J. ; LIN, X. F. ; NOGAMI, J.: Reexamination of the Ag/Si(111) - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ surface by scanning tunneling microscopy. In: *Phys. Rev. B* 45 (1992), S. 9509–9512. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.45.9509>. – DOI 10.1103/PhysRevB.45.9509
- [117] SATO, N. ; NAGAO, T. ; HASEGAWA, S.: Si(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag surface at low temperatures: symmetry breaking and surface twin boundaries. In: *Surf. Sci.* 442 (1999), Nr. 1, 65-73. [http://dx.doi.org/doi:10.1016/S0039-6028\(99\)00856-0](http://dx.doi.org/doi:10.1016/S0039-6028(99)00856-0). – DOI doi:10.1016/S0039-6028(99)00856-0
- [118] MATSUDA, I. ; MORIKAWA, H. ; LIU, C. ; OHUCHI, S. ; HASEGAWA, S. ; OKUDA, T. ; KINOSHITA, T. ; OTTAVIANI, C. ; CRICENTI, A. ; D'ANGELO, M. ; SOUKIASIAN, P. ; LAY, G. L.: Electronic Evidence of Asymmetry in the Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag Structure. In: *Phys. Rev. B* 68 (2003), S. 085407. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.68.085407>. – DOI 10.1103/PhysRevB.68.085407
- [119] TAKAHASHI, T. ; TAJIRI, H. ; SUMITANI, K. ; AKIMOTO, K. ; SUGIYAMA, H. ; ZHANG, X. ; KAWATA, H.: X-Ray diffraction study of the phase transition of the Si(111)($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)-Ag surface. In: *Surf. Rev. Lett.* 10 (2004), S. 519–524. <http://dx.doi.org/10.1142/S0218625X03005050>. – DOI 10.1142/S0218625X03005050
- [120] NAKAHARA, H. ; SUZUKI, T. ; ICHIMIYA, A.: Ag/Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ surface phase transition at low temperatures studied by RHEED. In: *Appl. Surf. Sci.* 234 (2004), Nr. 1-4, S. 292–296. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2004.05.043>. – DOI 10.1016/j.apsusc.2004.05.043
- [121] ZHANG, H. M. ; GUSTAFSSON, J. B. ; JOHANSSON, L. S. O.: The tip role on STM images of Ag/Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$. In: *J. Phys.: Conf. Ser.* 61 (2007), S. 1336–1340. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/61/1/264>. – DOI 10.1088/1742-6596/61/1/264
- [122] ZHANG, H. M. ; GUSTAFSSON, J. B. ; JOHANSSON, L. S. O.: Surface Atomic Structure of Ag/Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$. In: *Phys. Rev. B* 74 (2006), November, Nr. 20, 201304–4. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.74.201304>. – DOI 10.1103/PhysRevB.74.201304
- [123] BARKE, I. ; RÜGHEIMER, T.K. ; ZHENG, Fan ; HIMPSEL, F.J.: Atomically precise self-assembly of one-dimensional structures on silicon. In: *Appl. Surf. Sci.* 254

- (2007), S. 4–11. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2007.07.085>. – DOI 10.1016/j.apsusc.2007.07.085
- [124] NAKAJIMA, Y. ; TAKEDA, S. ; NAGAO, T. ; HASEGAWA, S.: Surface electrical conduction due to carrier doping into a surface-state band on Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag. In: *Phys. Rev. B* 56 (1997), S. 6782. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.56.6782>. – DOI 10.1103/PhysRevB.56.6782
- [125] SATO, N. ; NAGAO, T. ; HASEGAWA, S.: Two-dimensional adatom gas phase on the Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag surface directly observed by scanning tunneling microscopy. In: *Phys. Rev. B* 60 (1999), S. 16083–16087. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.60.16083>. – DOI 10.1103/PhysRevB.60.16083
- [126] CRAIN, J.N. ; ALTMANN, K.N. ; BROMBERGER, C. ; HIMPSEL, F.J.: Fermi surface of surface states on Si(111)-Ag, Au. In: *Phys. Rev. B* 66 (2002), S. 205302. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.66.205302>. – DOI 10.1103/PhysRevB.66.205302
- [127] MATSUDA, I. ; HIRAHARA, T. ; KONISHI, M. ; LIU, C. ; MORIKAWA, H. ; D'ANGELO, M. ; HASEGAWA, S. ; OKUDA, T. ; KINOSHITA, T.: Evolution of Fermi Surface by Electron Filling into a Free-Electronlike Surface State. In: *Phys. Rev. B* 71 (2005), S. 235315. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.71.235315>. – DOI 10.1103/PhysRevB.71.235315
- [128] WELLS, J.W. ; KALLEHAUGE, J.F. ; HOFMANN, Ph.: Thermal switching of the electrical conductivity of Si(111)($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)Ag due to a surface phase transition. In: *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (2007), Nr. 19, S. 176008. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/19/17/176008>. – DOI 10.1088/0953-8984/19/17/176008
- [129] HOFMANN, Ph. ; WELLS, J.W.: Surface-sensitive conductance measurements. In: *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009), S. 013003. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/1/013003>. – DOI 10.1088/0953-8984/21/1/013003. – topical review
- [130] CRAIN, J.N. ; GALLAGHER, M.C. ; MCCHESENEY, J.L. ; BISSEN, M. ; HIMPSEL, F.J.: Doping of a surface band on Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag. In: *Phys. Rev. B* 72 (2005), S. 045312. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.72.045312>. – DOI 10.1103/PhysRevB.72.045312

- [131] MATSUDA, I. ; LIU, C. ; HIRAHARA, T. ; UENO, M. ; TANIKAWA, T. ; KANAGAWA, T. ; HOBARA, R. ; YAMAZAKI, S. ; HASEGAWA, S.: Electron-Phonon Interaction and Localization of Surface-State Carriers in a Metallic Monolayer. In: *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007), S. 146805. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.146805>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.99.146805
- [132] YUROV, V. Y. ; KLIMOV, A.N.: Correction of drift and slope distortions in STM image and scanner calibration. In: *Surface and Interface Analysis* 22 (1994), S. 84–88. <http://dx.doi.org/10.1002/sia.740220121>. – DOI 10.1002/sia.740220121
- [133] WELLS, J.: *A combined study of the electronic structure and transport properties of surfaces.*, University of Aarhus, Denmark, Diss., 2006
- [134] SZE, S.M. ; NG, Kwok K.: *Physics of semiconductor devices*. Third Edition. Wiley, 2007
- [135] WOJTASZEK, M. ; KOLMER, M. ; GODLEWSKI, S. ; BUDZIOCH, J. ; SUCH, B. ; KROK, F. ; SZYMOSKI, M. ; JOACHIM, C. (Hrsg.): *Multi-probe characterization of 1d and 2d nanostructures assembled on Ge(001) surface by gold atom deposition and annealing*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012 (Advances in Atom and Single Molecule Machines, Atomic Scale Interconnection Machines). – 141 S. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-28172-3_11. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-28172-3_11
- [136] *Experimentelle Daten von M. Wojtaszek, Jagiellonian University of Krakow, Poland*
- [137] *COMSOL Multiphysics*. <http://www.comsol.com/>
- [138] *Experimentelle Daten von F. Krok, Jagiellonian University of Krakow, Poland*
- [139] TAO, Chenggang ; CULLEN, W.G. ; WILLIAMS, E.D.: Visualizing the electron scattering force in nanostructures. In: *Science* 328 (2010), S. 736. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1186648>. – DOI 10.1126/science.1186648
- [140] STAHLMECKE, B. ; CHELARU, L. I. ; HERINGDORF, F.-J. M. ; DUMPICH, G.: Electromigration in Gold and Single-Crystalline Silver Nanowires. In: *AIP Conf. Proc.* 817 (2006), S. 65. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2173533>. – DOI 10.1063/1.2173533

- [141] STAHLMECKE, B. ; HERINGDORF, F.-J. M. ; CHELARU, L. ; HOEGEN, M. H. ; DUMPICH, G. ; ROOS, K.R.: Electromigration in Self-Organized Single-Crystalline Silver Nanowires. In: *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006), Jan, S. 053122. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2172012>. – DOI 10.1063/1.2172012
- [142] HASAN, M.Z. ; KANE, C.L.: Colloquium: Topological insulators. In: *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010), Nr. 4, S. 3045–3067. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045>. – DOI 10.1103/RevModPhys.82.3045
- [143] HASAN, M.Z. ; MOORE, J.E.: Three-dimensional topological insulators. In: *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 2 (2011), S. 55–78. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-062910-140432>. – DOI 10.1146/annurev-conmatphys-062910-140432
- [144] BAUER, S.: *Ballistische Elektronenemissionsmikroskopie - Analyse der Systeme Sb/Si(111)-(7 × 7) und Sb/Si(001)-(2 × 1) durch ballistische Elektronen*, Universität Duisburg-Essen, Germany, Bachelorarbeit, 2011
- [145] BAUER, S.: *to be published: Transport auf mikroskopischer Skala*, Universität Duisburg-Essen, Germany, Diplomarbeit, 2013
- [146] GRAF, P.: *Mikroskopische Untersuchungen mit Hilfe eines Multispitzen-Rastertunnelmikroskops*, Universität Duisburg-Essen, Germany, Bachelorarbeit, 2012
- [147] JASCHINSKY, P. ; WENSORRA, J. ; LEPSA, M.I. ; MYSLIVECEK, J. ; VOIGTLÄNDER, B.: Nanoscale charge transport measurements using a double-tip scanning tunneling microscope. In: *J. Appl. Phys.* 104 (2008), S. 094307. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3006891>. – DOI 10.1063/1.3006891

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Personen danken, die am Gelingen dieser Promotion maßgeblich beteiligt waren.

An erster Stelle geht mein Dank an Prof. Dr. Rolf Möller. Er hat mir nicht nur ermöglicht in seiner Arbeitsgruppe an einem ganz starken Experiment in einem sehr interessanten Themenbereich zu promovieren, sondern stand mir dabei auch immer stets mit hilfsbereiter Hand und guten Tipps bei. Auch für die Möglichkeit, meine Ergebnisse vor internationalem Publikum vorstellen zu können möchte ich mich bedanken.

Selbstverständlich gebührt ebenso großer Dank meinem Leidensgenossen und Weggefährten am Nanoprobe: Dr. Alexander Bernhart. Zusammen gingen wir durch Dick und Dünn und waren ein gutes Team. Danke für die tolle Zeit, es war eine Bereicherung! Bedanken möchte ich mich auch bei Dr. Christian Bobisch. Er war immer Freund und Chef zugleich, meisterte diesen Spagat spielend und war stets Hilfe und Ideenpool; die FIFA-Matches bleiben unvergessen.

Die bisher genannten Personen haben in besonderem Maße zum Gelingen dieser Promotion beigetragen und daher gebührt Ihnen Dank an prominentester Stelle.

Aber damit nicht genug. Zum Gelingen einer Promotion bedarf es mehr. Den von uns betreuten Studenten Sebastian Bauer und Paul Graf möchte ich für die angenehme Atmosphäre und den frischen Wind danken. Bedanken möchte ich mich auch bei der Crew aus dem Nachbarlabor: Dr. Hatice Karacuban, Johannes Schaffert, Andreas Sonntag und Maren Cottin. Danke für die gute Musik, Laune, die derben Sprüche und dafür, dass Ihr wenigstens das Nanoprobe habt stehen lassen.

Ich möchte auch der AFM-Crew, namentlich Dr. Markus Fendrich, Manfred Lange und Dennis van Vörden, danken. Es war immer ein Spaß mit Euch!

Auch Ben Wortmann gebührt selbstverständlich Dank: Zum einen für die Inkarnation von Chuck Norris und zum anderen für die immer gute Laune, die er sich nie vermiesen lässt. Ganz erheblichen Beitrag zu dieser Promotion haben auch die folgenden drei Herren geleistet: Detlef Utzat, Willy Platz und Helmut Müntz. Ihnen gebührt Dank ganz unter-

schiedlicher Natur: Für das Lösen der vielen kleinen und großen Elektronikprobleme, für das Erfinden immer neuer Werkzeuge, ungebrochener Kreativität wenn es darum geht, mechanische Probleme zu lösen und immer mit helfender Hand und Natur zur Seite zu stehen. Doris Steeger möchte ich dafür danken, dass sie das schwierige Thema Arbeitssicherheit in die Hand genommen hat und uns so womöglich vor dem ein oder anderen Unglück bewahrt hat. Danke auch an Dagmar Thiele, die sich immer für uns einsetzt und das Unmögliche möglich macht.

Danke auch an die gesamte Gruppe um Prof. Dr. Hermann Nienhaus, als da wären: er selbst, Dr. David Krix, Uli Hagemann, Kornelia Huba, Martin Pfeiler, Felix Becker und Andrew Paolo Cadiz Bedini. Auch für die Fußball-Matches vielen Dank!

Auch dem Rest der Bachelor-Riege um Merlin Schmuck, Ebru Özen, Svenja Bachmann, Matthias Müller und Nico Schmidt sei gedankt für die tolle Atmosphäre. Bleibt der AG treu!

Allen Ehemaligen der AG, die in meine Wirkenszeit fallen, die aber hier nicht explizit erwähnt werden, möchte ich selbstverständlich ebenfalls danken, vor allem für die familiäre Aufnahme in die AG und die vielen anregenden Gespräche rund um und komplett ohne Physik. Ich glaube es ist selten, dass eine AG aus Freunden und nicht nur aus Kollegen besteht.

Bedanken möchte ich mich auch bei Mateusz Wojtaszek, mit dem mich vieles verbunden hat in der Zeit, in der er bei uns als Gastwissenschaftler im Labor mitarbeitete und darüber hinaus. Mein Dank geht auch an F. Krok für die Untersuchungen mit dem TEM. Dank gebührt auch Dr. Frank Meier-zu Heringdorf und Prof. i. R. Dr. Günter Dumpich für die fruchtbare Zusammenarbeit und Diskussionen auf dem Gebiet der Elektromigration.

Danken möchte ich auch Maria Dunke für die stets perfekte Organisation der zahlreichen SFB616-Workshops, an denen ich teilnehmen durfte. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft möchte ich für die Finanzierung durch den Sonderforschungsbereich 616 danken.

Auch außerhalb der Uni durfte ich starke Unterstützung von vielen Menschen erfahren. Meine Jugendliebe Andrea ist im Laufe der Promotion nicht nur Verlobte und schließlich Angetraute geworden; sie hat mir auch das Wunderbarste aller Geschenke bereitet: unseren gemeinsamen Sohn Finn. Ich danke Euch beiden aus tiefstem Herzen für nicht weniger als einfach Alles. Ich liebe Euch.

Danken möchte ich auch der besten Familie von allen: meiner. Danke vor allem an meine Eltern Brigitte und Josef und meinen Bruder Matthias für den Rückhalt im Studium und

während der Promotion.

Zu guter Letzt geht mein Dank an alle Freunde und Verwandte, die hier nicht explizit Erwähnung gefunden haben. Auch Ihr habt Euren Teil dazu beigetragen.

„The more that I see the less that I know for sure.“

- John Winston Lennon

Veröffentlichungen

Artikel

Bereits erschienen:

1. J. Homoth, M. Wenderoth, T. Druga, L. Winking, R.G. Ulbrich, C.A. Bobisch, B. Weyers, A. Bannani, E. Zubkov, A.M. Bernhart, **M.R. Kaspers** und R. Möller: *Electronic Transport on the Nanoscale: Ballistic Transmission and Ohm's Law*. In: Nano Letters **9**, 1588 (2009) → [4].
2. **M.R. Kaspers**, A.M. Bernhart, F.-J. Meyer zu Heringdorf, G. Dumpich und R. Möller: *Electromigration and potentiometry measurements of single-crystalline Ag nanowires under UHV conditions*. In: J. Phys.: Condens. Matter **21**, 265601 (2009) → [101].
3. C.A. Bobisch, A. M. Bernhart, **M. R. Kaspers**, M. C. Cottin, J. Schaffert und R. Möller: *Electronic Transport on the Nanoscale*. In: „Atomic Scale Interconnection Machines, Advances in Atom and Single Molecule Machines“, Edited by C. Joachim (2012) → [108].
4. **M.R. Kaspers**, A.M. Bernhart, C.A. Bobisch und R. Möller: *Current induced surface diffusion on a single-crystalline silver nanowire*. In: Nanotechnology **23**, 205706 (2012) → [102].

In Vorbereitung:

1. **M.R. Kaspers**, A.M. Bernhart, M. Wojtaszek, F. Krok, M. Szymonski, R. Möller und C.A. Bobisch: *Scanning tunneling potentiometry on the Au/Ge(001) surface*.
2. A.M. Bernhart, **M.R. Kaspers**, C.A. Bobisch und R. Möller: *Probing transport properties of organic molecules by injecting ballistic holes*.

3. A.M. Bernhart, **M.R. Kaspers**, R. Möller und C.A. Bobisch und D. Diesing: *Excited electron transport through aluminum oxide based heterosystems studied by ballistic electron emission and internal photo emission*.

Konferenzbeiträge

Vorträge

1. **M.R. Kaspers**², A.M. Bernhart, B. Weyers, R. Möller, C.A. Bobisch, E. Zubkov, J. Homoth, M. Wenderoth, T. Druga, L. Winking und R.-G. Ulbrich: *Variations of the electrochemical potential at monoatomic steps resolved by scanning tunneling potentiometry*, DPG-Frühjahrstagung, Berlin (2008).
2. C.A. Bobisch*, **M.R. Kaspers**, A.M. Bernhart, M.C. Cottin, J. Schaffert, G. Jnawali, A. Sonntag und R. Möller: *Scattering of surface state electrons at defects*, International Workshop on Nanomaterials and Nanodevices, Peking (2010).
3. J. Hopster, M. Schleberger, L. Breuer, A. Wucher, A.M. Bernhart, **M.R. Kaspers**, C.A. Bobisch, R. Möller und D. Diesing*: *Transmission of ballistic electrons through metal-insulator-metal heterosystems*, DPG-Frühjahrstagung, Dresden (2011).
4. C.A. Fobbe*, I. Laubenstein, M. Ruth, M.H.W. Bader, A.M. Bernhart, **M.R. Kaspers**, C.A. Bobisch, R. Möller und C. Meier: *Piezoelectric properties of ZnO and (Zn,Mg)O-microstructures*, DPG-Frühjahrstagung, Dresden (2011).
5. C.A. Bobisch*, **M.R. Kaspers**, A.M. Bernhart, M. Wojtaszek, F. Krok, M. Szymonski und R. Möller: *Scanning tunneling potentiometry on the Au/Ge(001) surface*, DPG-Frühjahrstagung, Berlin (2012).

Poster

1. A.M. Bernhart*, **M.R. Kaspers**, A. Bannani, C. Bobisch, E. Zubkov, B. Weyers und R. Möller: *Energy dissipation of ballistic injected electrons and holes through individual molecules*, DPG-Frühjahrstagung, Berlin (2008).

²Die Asterisken markieren jeweils den präsentierenden Autor.

2. **M.R. Kaspers***, A.M. Bernhart, C.A. Bobisch, F.-J. Meyer zu Heringdorf, G. Dimpich und R. Möller: *Electromigration and Potentiometry Measurements of Monocrystalline Ag-Nanowires under UHV-Conditions*, ECOSS, Parma (2009).
3. A.M. Bernhart*, **M.R. Kaspers**, C.A. Bobisch und R. Möller: *Mean free path of hot electrons in thin bismuth films*, ECOSS, Parma (2009).
4. **M.R. Kaspers***, A.M. Bernhart, C.A. Bobisch und R. Möller: *Electromigration on Ag-nanowires studied down to the atomic scale*, DPG-Frühjahrstagung, Dresden (2011).
5. A.M. Bernhart*, **M.R. Kaspers**, C.A. Bobisch und R. Möller: *Ballistic hole transport through PTCDA molecules*, DPG-Frühjahrstagung, Dresden (2011).
6. **M.R. Kaspers**, A.M. Bernhart, M. Wojtaszek, F. Krok, M. Szymonski, R. Möller and C.A. Bobisch*: *Scanning Tunneling Potentiometry on the Au/Ge(001) Surface*, ICN+T, Paris (2012).

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die Arbeit wurde unter wissenschaftlicher Betreuung durch Herrn Prof. Dr. Rolf Möller an der Fakultät für Physik der Universität Duisburg-Essen angefertigt.

Duisburg, 18. Februar 2013

Mark R. Kaspers